

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Penelitian Terdahulu

Beberapa penelitian yang pernah dilakukan dengan tema kesetimbangan uap-cair maupun kesetimbangan uap-cair-cair dalam pemurnian butanol adalah sebagai berikut:

1. Hellwig dan Winkle. (1952) melakukan pengukuran dan penghitungan kesetimbangan uap cair untuk sistem biner etanol dengan beberapa jenis alkohol dan beberapa jenis keton, diantaranya adalah sistem biner etanol + 2-butanol pada tekanan operasi 760 mmHg dengan menggunakan alat ebulliometer sederhana. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan Wilson, NRTL, dan UNIQUAC.
2. Campbell dkk. (1987) melakukan pengukuran dan penghitungan kesetimbangan uap cair untuk sistem biner etanol + aseton pada range suhu 372-423 K. Tekanan operasi untuk sistem etanol + aseton adalah 75-286 kPa dengan menggunakan alat ebulliometer sederhana. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan Wilson, NRTL, dan UNIQUAC.
3. Lee dan Hu. (1995) melakukan pengukuran dan penghitungan kesetimbangan uap cair untuk sistem terner etanol + aseton + diisopropil eter pada range suhu 343-363 K. Tekanan operasi untuk sistem etanol + aseton adalah 75-286 kPa dengan menggunakan alat ebulliometer sederhana. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan Wilson, NRTL, dan UNIQUAC.
4. Ku dan Tu. (2005) melakukan pengukuran dan penghitungan kesetimbangan uap cair untuk sistem terner etanol + aseton + 2,2,4-trimetilpentana pada tekanan operasi 101.3 kPa dengan menggunakan alat ebulliometer modifikasi. Parameter kesetimbangan yang digunakan yaitu model persamaan Wilson, NRTL, dan UNIQUAC.

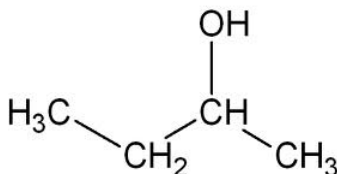
5. Iwakabe dan Kosuge. (2005) meneliti tentang estimasi isobarik VLLE untuk system terner *partial miscible*. Parameter NRTL dan UNIQUAC untuk sistem etanol + 2-butanol + air dan etanol + air + 1-butanol ditentukan dari data VLE campuran biner dan data VLLE data sistem terner. Parameter tersebut digunakan untuk menghitung VLLE terner isobarik. VLLE terner isobarik dihitung dengan parameter ditentukan dari data VLE isobarik dari campuran biner.
6. Younis dkk. (2006) meneliti tentang isobarik VLLE (*vapor-liquid-liquid equilibria*) untuk sistem kuarterner air + etanol + aseton + n-butil asetat dan air + etanol + aseton + metil etil keton (unsur campuran *partially miscible*). Data yang diukur diolah tes konsistensi termodinamika nya berdasarkan *isobaric point-by-point thermodynamic consistency criterion* dari Wisniak.

2.2 2-Butanol

2-butanol atau sec-butanol adalah jenis alkohol sekunder dengan 4 karbon yang terstruktur dengan rumus molekulnya adalah $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{CH}_3$, yang merupakan isomer dari butanol ($\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$). Zat ini mudah terbakar, cairan yang tidak berwarna, dan terlarut sempurna pada pelarut organik polar seperti eter dan alkohol lainnya. Pada produksi dalam skala besar, kegunaan utama dari 2-butanol adalah sebagai pelopor dari pelarut industri yaitu metil etil keton. 2-butanol biasanya dibuat dari proses hidrasi 2-butana atau fermentasi dari molase dengan campuran berbagai jenis butanol lainnya. 2-butanol juga dapat digunakan sebagai bahan pembuat ester pada industri parfum. Selain itu, 2-butanol juga dapat digunakan sebagai salah satu bahan campuran alkohol untuk proses pembuatan biodiesel. Di bawah ini adalah tabel tentang spesifikasi 2-butanol:

Tabel 2.1 Properti 2-Butanol

Massa Molar	74.122 g/mol
Tekanan Uap	12.5 mmHg (20°C)
Densitas	806.3 kg/m ³
Titik Lebur	-115 °C
Titik Didih	99 °C
Kelarutan Dalam Air	290 g/liter



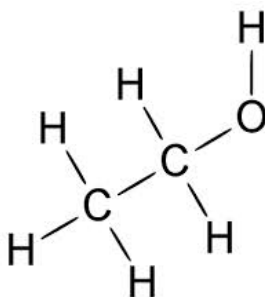
Gambar 2.1. Rumus Struktur 2-Butanol

2.3 Etanol

Etanol atau etil alkohol adalah jenis alkohol primer dengan 2 karbon yang terstruktur dengan rumus molekulnya adalah C₂H₅OH. Zat ini adalah cairan yang mudah menguap, mudah terbakar, merupakan cairan yang tidak berwarna, dan merupakan alkohol yang paling sering digunakan dalam kehidupan sehari-hari. Etanol paling banyak dibuat melalui fermentasi molase dengan bantuan kultur bakteri dan terus berkembang proses pembuatannya karena merupakan jenis alkohol sederhana. Etanol telah digunakan secara luas sebagai zat pelarut terutama dalam industri parfum, pewarna, dan obat-obatan. Selain itu, etanol juga dapat digunakan sebagai salah satu bahan campuran alkohol untuk proses pembuatan biodiesel karena memiliki potensi biofuel yang sangat besar. Di bawah ini adalah tabel tentang spesifikasi etanol :

Tabel 2.2 Properti Etanol

Massa Molar	46.07 g/mol
Tekanan Uap	43 mmHg (20°C)
Densitas	789 kg/m ³
Titik Lebur	-114 °C
Titik Didih	78.37 °C



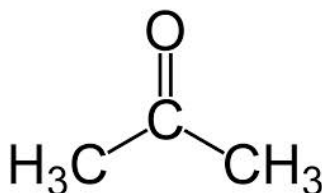
Gambar 2.2 Rumus Struktur Etanol

2.4 Aseton

Aseton adalah jenis keton yang paling sederhana dengan 3 karbon yang terstruktur dengan rumus molekulnya adalah C_3H_6O . Aseton adalah senyawa berbentuk cairan yang tidak berwarna dan mudah terbakar. Aseton juga larut sempurna dalam berbagai perbandingan dengan air, etanol, dietil eter, dan lainnya. Aseton biasanya digunakan sebagai pelarut, bahan pembuat plastic, serat, obat-obatan, dan senyawa-senyawa kimia lainnya. Aseton paling sering dibuat secara langsung maupun tidak langsung dari propena. Selain itu, aseton juga dapat ditemukan secara alami termasuk pada tubuh manusia dalam kandungan yang kecil dengan proses dekarboksilasi keton. Di bawah ini adalah tabel tentang spesifikasi aseton :

Tabel 2.3 Properti Aseton

Massa Molar	58.08 g/mol
Densitas	791 kg/m ³
Titik Lebur	-95 °C
Titik Didih	56 °C
Kelarutan Dalam Air	larut dalam berbagai perbandingan



Gambar 2.3 Rumus Struktur Aseton

2.5 Keseimbangan Uap-Cair (VLE)

Sejumlah proses pemisahan yang penting dalam dunia industri seperti absorpsi, ekstraksi, dan distilasi merupakan operasi kontak semisal 2 fase. Bila fase-fase tersebut tidak berada dalam keseimbangan maka akan terjadi *transfer* massa antar fase, laju *transfer* massa pada masing-masing komponen tergantung pada *driving force*, dalam hal ini adalah besarnya penyimpangan sistem dari suatu keseimbangan. Dengan demikian, penentuan laju *transfer* massa memerlukan data keseimbangan dari sistem tersebut. Keseimbangan adalah kondisi statis dimana secara makroskopis tidak ada perubahan *property* sistem terhadap waktu (Smith dkk, 2001).

Apabila suatu campuran zat cair berada dalam keseimbangan dengan campuran uap pada suhu dan tekanan yang sama, besaran yang diperlukan adalah suhu, tekanan dan komposisi kedua fase. Suatu sistem dikatakan setimbang secara termodinamika jika sistem tersebut tidak mengalami kecenderungan ke arah perubahan pada skala makroskopis. Uap berasal dari fase liquid yang menunjukkan kecenderungan untuk

berubah menjadi uap. Sebaliknya, fase uap juga memiliki kecenderungan menjadi fase liquid dengan cara kondensasi. Kecenderungan untuk berubah fase dapat diukur dengan kuantitas f yang disebut fugasitas. Pada keadaan setimbang properti-properti yang teramati tidak berubah terhadap waktu, sehingga properti-properti intensif atau potensial termodinamikanya (suhu, tekanan, potensial kimia) sama dalam suatu sistem. Keseragaman tersebut berpengaruh pada tidak adanya *transfer* panas, *transfer* massa, dan kerja dari dalam maupun ke luar sistem. Kesetimbangan antara fase uap dan cair tersebut dinamakan sebagai VLE (*Vapor-Liquid Equilibria*).

Untuk setiap komponen dalam campuran, kondisi kesetimbangan dapat dinyatakan dengan persamaan :

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad (2.1)$$

Dengan : V = untuk fase uap
 L = untuk fase liquid

Untuk fase uap dengan fraksi mol y , hubungan antara fugasitas dengan suhu, tekanan dan fraksi mol, koefisien fugasitas dapat dinyatakan dengan persamaan :

$$\hat{f}_i^V = y_i \hat{\phi}_i P \quad (2.2)$$

Fugasitas komponen i dalam fase cair terhubung dengan komposisi fase yang bersangkutan melalui koefisien aktivitas γ yang dapat dinyatakan dengan persamaan :

$$\hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i^0 \quad (2.3)$$

Dengan harga f_i^0 didapatkan dari persamaan berikut :

$$f_i^0 = P_i^{sat} \phi_i^{sat} \exp\left(\frac{V_i(P - P_i^{sat})}{RT}\right) \quad (2.4)$$

Pada tekanan rendah, faktor eksponensial (*pointing factor*) yang nilainya mendekati 1 dan ϕ_i dianggap 1 sehingga :

$$\hat{f}_i^L = \gamma_i x_i P_i^{sat} \quad (2.5)$$

Pada tekanan rendah fase gas diasumsikan mengikuti kelakuan gas ideal maka:

$$\hat{\phi}_i = 1 \quad (2.6)$$

Maka dari persamaan (2.2) dan (2.5) didapatkan persamaan:

$$y_i P = P_i^{sat} \gamma_i x_i \quad (2.7)$$

Sedangkan koefisien aktivitas dinyatakan dengan persamaan:

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i^L}{x_i f_i^0} = \frac{y_i P}{x_i P_i^{sat}} \quad (2.8)$$

Pada persamaan Gibbs Duhem dinyatakan bahwa di dalam suatu campuran, koefisien aktivitas tiap komponennya tidak bebas terhadap yang lain melainkan terhubung melalui persamaan diferensial. Persamaan umum Gibbs Duhem yaitu sebagai berikut :

$$\left[\frac{\partial M}{\partial P} \right]_{T,x} dP + \left[\frac{\partial M}{\partial T} \right]_{P,x} dT - \sum_i x_i d\bar{M}_i = 0 \quad (2.9)$$

Pada P dan T konstan, maka :

$$\sum_i x_i d\bar{M}_i = 0 \quad (2.10)$$

Jika $\ln \gamma_i$ adalah properti parsial, maka persamaan (2.10) menjadi :

$$\sum_i x_i d \ln \gamma_i = 0 \quad (2.11)$$

Maka diperoleh hubungan persamaan Gibbs Duhem untuk sistem biner sebagai berikut :

$$x_1 \left[\frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial x_1} \right]_{T,P} = x_2 \left[\frac{\partial \ln \gamma_2}{\partial x_2} \right]_{T,P} \quad (2.12)$$

Agar suatu data mudah diolah maka harganya relatif terhadap suatu keadaan ideal dengan eksese properti yaitu perbedaan antara harga nyata dan harga idealnya, dimana :

$$M^E = M - M^{id} \quad (2.13)$$

$$nG^E = nG - nG^{id} \quad (2.14)$$

Penggunaan persamaan Gibbs Duhem paling baik dilakukan melalui konsep kelebihan energi Gibbs (*excess* energi Gibbs), yaitu energi Gibbs teramati pada suatu campuran yang di atas atau lebih besar untuk larutan ideal pada suhu, tekanan dan komposisi yang sama.

Total kelebihan energi Gibbs G^E untuk larutan biner, mengandung n_1 mol komponen 1 dan n_2 mol komponen 2 di definisikan dengan :

$$G^E = RT (n_1 \ln \gamma_1 - n_2 \ln \gamma_2) \quad (2.15)$$

Pada Persamaan Gibbs Duhem kita dapat menghubungkan koefisien aktifitas tiap komponen γ_1 dan γ_2 dengan G^E melalui diferensiasi :

$$RT \ln \gamma_1 = \left[\frac{\partial G^E}{\partial n_1} \right]_{T,P,n_2} \quad (2.16)$$

$$RT \ln \gamma_2 = \left[\frac{\partial G^E}{\partial n_2} \right]_{T,P,n_1} \quad (2.17)$$

Persamaan untuk mencari konstanta kesetimbangannya adalah

$$K_i = \frac{\gamma_i P^{sat}}{P} \quad (2.18)$$

Maka didapat persamaan berikut :

$$K_i = \frac{\gamma_i P^{sat}}{P} \quad (2.19)$$

2.6 Persamaan–Persamaan Koefisien Aktifitas

Model energi Gibbs seperti Wilson, NRTL (*Non Random Two Liquid*), UNIFAC (*Universal Functional Activity Coefficient*) dan UNIQUAC (*Universal Quasi-Chemical*) sering digunakan untuk korelasi VLE campuran non-ideal seperti alkohol-hidrokarbon. Model ini membutuhkan parameter

interaksi biner tiap pasangan antar molekulnya (*pair*). Ini digunakan untuk campuran multikomponen.

2.6.1 Persamaan NRTL

Persamaan NRTL dikemukakan oleh Renon dan Prauznitz (1968) (Poling dkk, 1999). Persamaan ini diturunkan berdasarkan konsep *local composition* yang dipelopori oleh Wilson. Persamaan NRTL ini dapat digunakan untuk sistem yang larut sebagian maupun untuk sistem yang larut sempurna. Persamaan ini dapat dipakai secara luas dalam VLE, LLE, dan VLLE untuk berbagai jenis zat, misalnya campuran hidrokarbon jenuh dan spesies polar, campuran senyawa non-polar, campuran spesies non-polar dan polar, campuran air dan spesies polar, dan campuran alkohol dengan campuran spesies non-polar.

Persamaan NRTL mempunyai tiga parameter yaitu, dengan tambahan parameter (α) yang membuat persamaan tersebut dapat diaplikasikan untuk berbagai jenis campuran dan kesetimbangan cair-cair dengan cara yaitu memilih α yang sesuai. Perhitungan parameter untuk persamaan ini dilakukan dengan menetapkan harga α pada nilai tertentu dan selanjutnya melakukan optimasi untuk memperoleh dua parameter. Harga α biasanya berada diantara 0.2 sampai 0.47. Angka ini diperoleh dari beberapa eksperimen sistem biner. Walaupun lebih rumit, persamaan ini yaitu dapat membuat sistem ideal dan non ideal. Jadi, apabila dalam mempelajari sistem biner ini hanya terlarut sebagian dalam range konsentrasi yang ditinjau maka digunakan persamaan NRTL. (Smith dkk, 2001). Persamaan NRTL untuk sistem biner dinyatakan dengan :

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_2 \left(\frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right) \quad (2.26)$$

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \left[\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right]^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (2.27)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{21} \left[\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right]^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \quad (2.28)$$

dimana,

$$\ln G_{12} = -\alpha_{12} \tau_{12} \quad (2.29)$$

$$\ln G_{21} = -\alpha_{12} \tau_{21} \quad (2.30)$$

$$\tau_{12} = \frac{b_{12} - b_{21}}{RT} \quad (2.31)$$

$$\tau_{21} = \frac{b_{21} - b_{12}}{RT} \quad (2.32)$$

Persamaan koefisien aktifitas untuk sistem biner dan multikomponen lain dapat diturunkan dari persamaan dasarnya yaitu :

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^n G_{ki} x_k} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{k=1}^n x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} x_k} \right) \quad (2.33)$$

Keuntungan menggunakan persamaan NRTL diantaranya adalah pengalaman telah menunjukkan bahwa persamaan model NRTL ini memiliki keunggulan yang konsisten dibanding Van Laar dan Margules dalam arti persamaan ini biasanya dapat menangani keadaan-keadaan yang sangat tidak ideal, hanya dengan dua atau tiga parameter yang dapat disesuaikan. Persamaan NRTL sesuai untuk sistem multikomponen. Dapat digunakan untuk sistem VLE dan LLE. Untuk sistem organik akan diperoleh hasil yang baik dan akurat, dan dapat dipakai untuk larutan yang saling larut sempurna dan yang larut sebagian. Sedangkan kekurangan dari persamaan NRTL adalah membutuhkan tiga parameter biner, perlu kehati-

hatian dalam pemilihan α (biasanya diperoleh dari data percobaan sebelumnya), dan tidak dapat dipakai untuk senyawa jenis polimer.

2.6.2 Persamaan UNIQUAC

Persamaan UNIQUAC dikemukakan oleh Abrams dan Prausnitz (1975) (Poling dkk, 1999). Persamaan ini pada dasarnya merupakan kelanjutan dari teori *quasi-chemical* dari Guggenheim untuk campuran *non-random* yang diaplikasikan untuk larutan yang mengandung molekul-molekul yang memiliki ukuran yang berbeda. Persamaan ini juga dapat digunakan untuk sistem cair yang larut sempurna maupun larut sebagian. Persamaan ini dapat diaplikasikan untuk campuran cair *non-elektrolit*, baik polar maupun non-polar, seperti hidrokarbon, alkohol, nitril, keton, aldehid, dan sebagainya.

Persamaan UNIQUAC dipisahkan menjadi dua bagian yaitu bagian kombinatorial yang terdiri dari parameter komponen murni saja untuk menghitung perbedaan bentuk dan ukuran molekul, serta bagian residual yang menggabungkan dua parameter biner tiap pasang molekul untuk menghitung interaksi molekul.

$$g = g^c + g^R \quad (2.34)$$

Untuk sistem multikomponen :

$$g^c = \sum_i x_i \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} \quad (2.35)$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln \left(\sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) \quad (2.36)$$

Dimana $i, j, k, \dots = 1, 2, 3, \dots, N$ (komponen), serta :

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (2.37)$$

$$\Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.38)$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(-\frac{(a_{ji} - a_{ii})}{T}\right) \quad (2.39)$$

$$a_{ii} = a_{jj} = a_{kk} = 0 \quad (2.40)$$

$$a_{ji} = a_{ij} \quad (2.41)$$

Dan $z = 10$ (ditetapkan). Koefisien aktivitas untuk sembarang komponen i dinyatakan sebagai berikut :

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\theta_i}{\phi_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left(\sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{kj}} \quad (2.42)$$

Dan persamaan berikut :

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.43)$$

Model UNIQUAC dapat diterapkan untuk memprediksi kesetimbangan uap-cair sistem multi komponen dengan parameter energi interaksi sistem biner. Keuntungan menggunakan Persamaan UNIQUAC adalah hanya mempunyai dua parameter yang dapat disesuaikan, mempunyai ketergantungan yang lebih kecil terhadap suhu, dan dapat diterapkan pada larutan dengan molekul-molekul yang besar atau kecil sebab variabel konsentrasi primer merupakan fraksi permukaan dan bukan fraksi mol.

2.7 Tes Konsistensi Termodinamika

Data percobaan yang diperoleh dari penelitian tidak bisa langsung dipakai dan dihitung, tetapi harus dipastikan terlebih dahulu bahwa data percobaan tersebut akurat secara termodinamika. Untuk data percobaan kesetimbangan uap-cair sistem biner atau multikomponen, keakuratannya diuji dengan Persamaan Gibbs-Duhem. Uji keakuratan data percobaan secara

termodinamika dilakukan dengan cara korelasi terhadap persamaan Gibbs-Duhem, untuk melihat seberapa besar penyimpangannya terhadap persamaan tersebut. Secara umum penurunan rumus dari persamaan Gibbs-Duhem yang digunakan untuk menghitung konsistensi data.

$$\partial \ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) = x_1 \left(\frac{d \ln \gamma_1^*}{dx_1} \right) + x_2 \left(\frac{d \ln \gamma_2^*}{dx_2} \right) \quad (2.44)$$

dimana :

γ = koefisien aktifitas dari persamaan korelasi (NRTL dan UNIQUAC)

γ^* = koefisien aktifitas dari data percobaan

Jika suku kanan dari persamaan tersebut bernilai nol atau suatu harga yang dapat ditoleransi penyimpangannya dari nol maka data dinyatakan konsisten. Sedangkan suku kiri dari persamaan di atas digunakan untuk mengukur secara langsung penyimpangan terhadap persamaan Gibbs-Duhem. Terdapat banyak sekali penggunaan metode uji konsistensi dalam termodinamika seperti metode tes luasan (integral), metode diferensial, *infinite dilution test*, dan sebagainya.

Pada tahun 1990 Kojima dkk. telah mengusulkan ada 3 metode tes ekstrapolasi untuk memeriksa data percobaan untuk konsistensi termodinamika, yaitu metode Tes Luasan (*Area Test*), metode *Point Test*, dan metode *Infinite Dilution Test*. Dalam metode perhitungannya, fungsi pendekatan kurva dicari yang cocok untuk nilai $\ln (\gamma_1/\gamma_2)$ dan G^E/RT percobaan. Fungsi ini diekstrapolasi dari $x_1 = 0$ hingga $x_1 = 1$ untuk mendapatkan nilai $\ln (\gamma_1/\gamma_2)$ dan G^E/RT dari persamaan korelasi sehingga selisih yang didapat seminimal mungkin. Persamaan Gibbs-Duhem untuk sistem biner yaitu sebagai berikut:

$$G^E = RT (x_1 \ln \gamma_1 + x_2 \ln \gamma_2) \quad (2.45)$$

Jika didiferensialkan terhadap x_1 , maka didapat:

$$\frac{dG^E}{RT} = dx_1 \left(\frac{x_1 d \ln \gamma_1}{dx_1} + \frac{x_2 d \ln \gamma_2}{dx_2} + \ln \gamma_1 \frac{dx_2}{dx_1} - \ln \gamma_2 \frac{dx_2}{dx_1} \right) \quad (2.46)$$

Dimana : $dx_2 = -dx_1$

$$d \left(\frac{G^E}{RT} \right) = dx_1 \left(\frac{x_1 d \ln \gamma_1}{dx_1} + \ln \gamma_1 + \frac{x_2 d \ln \gamma_2}{dx_2} - \ln \gamma_2 \right) \quad (2.47)$$

Dan,

$$x_1 \frac{d \ln \gamma_1}{dx_1} + x_2 \frac{d \ln \gamma_2}{dx_2} = 0 \quad (2.48)$$

Maka didapat:

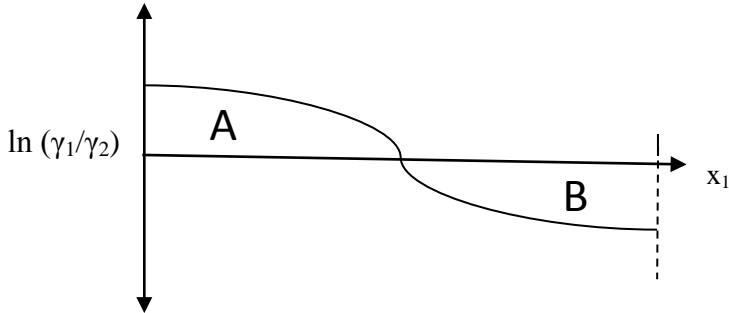
$$d \left(\frac{G^E}{RT} \right) = \ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) dx_1 \quad (2.49)$$

Dengan mengintegralkan persamaan di atas dengan batas $x_1 = 0$ hingga $x_1 = 1$, didapat:

$$\int_{x_1=0}^{x_1=1} \ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) dx_1 = \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{x_1=1} - \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{x_1=0} \quad (2.50)$$

Koefisien aktifitas $\gamma_1 = 1$ untuk komponen murni ($x_1 = 1$) dan sebaliknya akan $\ln \gamma_1$ akan mendekati suatu harga limit tertentu yang ditandai dengan γ_1^∞ untuk $x_1 = 0$, sehingga menjadi :

$$\int_{x_1=0}^{x_1=1} \ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) dx_1 = 0 \quad (2.51)$$



Gambar 2.4 Kurva Luasan Tes Konsistensi Termodinamika Metode Area Test

Pada Gambar 2.4 di atas, dapat dilihat plot antara $\ln (\gamma_1/\gamma_2)$ korelasi terhadap x_1 percobaan. Metode ini dinamakan metode Tes Luasan (*Area Test*), dimana luas daerah di atas sumbu x_1 (A) dan luas daerah di bawah sumbu x_1 (B) harus sama. Sedangkan untuk plot antara G^E/RT korelasi terhadap x_1 percobaan, akan digunakan pada 2 metode lainnya yaitu metode *Point Test* dan metode *Infinite Dilution Test*. Setelah diplot,

parameter persamaan Redlich-Kister yang paling mendekati distribusi data yang telah diplot kemudian dari plot tersebut dicari nilai-nilai absolut selisih luasan (Philip dkk, 1994). Seperti kriteria yang diajukan oleh Kojima dkk., maka data percobaan harus memenuhi syarat dari ketiga metode tersebut sehingga dapat dikatakan konsisten. Syarat untuk metode *Area Test* harus kurang dari 3%, untuk metode *Point Test* harus kurang dari 5%, dan untuk metode *Infinite Dilution Test* harus kurang dari 30%. Persamaan Redlich-Kister yang digunakan sebagai berikut :

$$\ln \left(\frac{y_1}{y_2} \right) = a + b(x_2 - x_1) + c(6x_2x_1 - 1) + d(x_2 - x_1)(1 - 8x_2x_1) \quad (2.52)$$

$$\frac{G^E}{RT} = x_1x_2[B + C(x_1 - x_2) + D(x_1 - x_2)^2 + E(x_1 - x_2)^2] \quad (2.53)$$

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)

**PENGUKURAN KESETIMBANGAN UAP-CAIR
SISTEM BINER ETANOL + 2-BUTANOL DAN ASETON +
2-BUTANOL, SERTA SISTEM TERNER ETANOL +
ASETON + 2-BUTANOL PADA TEKANAN 101.33 kPa**

TUGAS AKHIR

Diajukan untuk Memenuhi Salah Satu Syarat
Memperoleh Gelar Sarjana Teknik,
Pada Program Studi S-1 Jurusan Teknik Kimia,
Fakultas Teknologi Industri
Institut Teknologi Sepuluh Nopember
Surabaya

Oleh :

RIZKI AULIA RAHMAN

NRP. 2310 100 036

DIDIK AGUS KURNIAWAN

NRP. 2310 100 068

Disetujui Oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Dr. Ir. Kuswandi, DEA (Pembimbing I)
2. Ir. Winarsih (Pembimbing II)
3. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng (Penguji I)
4. Dr. Ir. Sri Rachmania J., M.Eng (Penguji II)
5. Dr. Ir. Samsudin Affandi, MS (Penguji III)



**SURABAYA
JULI 2014**

**PENGUKURAN KESETIMBANGAN UAP-CAIR
SISTEM BINER ETANOL + 2-BUTANOL DAN
ASETON + 2-BUTANOL, SERTA SISTEM TERNER
ETANOL + ASETON + 2-BUTANOL
PADA TEKANAN 101.33 kPa**

Nama : Rizki Aulia Rahman (2310 100 036)
Didik Agus Kurniawan (2310 100 068)
Jurusan : Teknik Kimia FTI – ITS
Pembimbing : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Ir. Winarsih

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan uap-cair (VLE) sistem biner etanol + 2-butanol dan aseton + 2-butanol, serta sistem terner etanol + aseton + 2-butanol pada tekanan 101.33 kPa. Data yang diperoleh dikorelasikan dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC. Peralatan percobaan yang digunakan pada penelitian ini adalah peralatan Ebulliometer termodifikasi. Peralatan telah divalidasi dengan cara mengukur suhu uap murni larutan etanol, aseton, 2-butanol, serta H₂O dan membandingkan hasilnya dengan persamaan Antoine. Untuk sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3) pada tekanan 101.33 kPa, hasil korelasi dengan model NRTL menghasilkan RMSD T dan y_1 masing-masing sebesar 0.282 dan 0.162; serta 0.891 dan 0.0597, sedangkan model UNIQUAC masing-masing sebesar 0.412 dan 0.153; serta 0.948 dan 0.0582. Dan untuk sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3) pada tekanan 101.33 kPa, hasil korelasi dengan model NRTL menghasilkan RMSD T , y_1 , y_2 , dan y_3 masing-masing sebesar 0.902; 0.09; 0.08; dan 0.042, sedangkan model UNIQUAC masing-masing sebesar 0.786; 0.066; 0.045; dan 0.041.

Kata kunci: Kesetimbangan uap-cair, biner, etanol, 2-butanol, aseton, terner.

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)

**MEASUREMENT OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA
FOR BINARY SYSTEMS ETHANOL + 2-BUTANOL
AND ACETONE + 2-BUTANOL,
TERNARY SYSTEM ETHANOL + ACETONE
+ 2-BUTANOL AT 101.33 kPa**

Name : Rizki Aulia Rahman (2310 100 036)
Didik Agus Kurniawan (2310 100 068)
Departement : Chemical Engineering FTI – ITS
Advisor : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Ir. Winarsih

ABSTRACT

The objective of this research to measure vapor-liquid equilibrium (VLE) data for binary ethanol + 2-butanol and acetone + 2-butanol, also ternary systems ethanol + acetone + 2-butanol at 101.33 kPa. The experimental data were correlated using NRTL and UNIQUAC equations. The experimental apparatus used in this experiment was modified Ebulliometer. The validation of experimental apparatus was done by measuring the temperatures of a pure solutions of ethanol, acetone, 2-butanol, and H₂O vapor, and comparing the results with the Antoine equation. For the binary systems ethanol (1) + 2-butanol (3) and acetone (2) + 2-butanol (3) at 101.33 kPa pressure, the results of correlation with NRTL model generate RMSD T and y_1 respectively 0.282 and 0.162; 0.891 and 0.0597, while the UNIQUAC model respectively 0.412 and 0.153; 0.948 and 0.0582. And for the ternary system ethanol (1) + acetone (2) + 2-butanol (3) at 101.33 kPa, the results of correlation with NRTL model generate RMSD T, y_1 , y_2 , and y_3 respectively 0.902; 0.09; 0.08; and 0.042, whereas UNIQUAC model respectively 0.786; 0.066; 0.045; and 0.041.

Keyword: vapor-liquid equilibria, binary, ethanol, 2-butanol, acetone, ternary.

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)

DAFTAR NOTASI

A	Area atau luasan
A_{ij}, A_{ji}	Parameter biner
A_i, B_i, C_i	Konstanta untuk persamaan <i>Antoine</i>
α_{ij}, α_{ji}	Parameter untuk persamaan UNIQUAC
b_{ij}, b_{ji}	Parameter untuk persamaan NRTL
f_i	Fugasitas untuk komponen murni i
f_i^o	Fugasitas pada keadaan standar untuk komponen i
\hat{f}_i	Fugasitas untuk komponen i dalam larutan
G	Energi Gibbs molar
G_i^o	Energi Gibbs pada keadaan standar untuk komponen i
G^E	Energi Gibbs <i>excess</i>
I_i	Nilai <i>Infinite Dilution</i> untuk komponen i
n	Jumlah mol total, mol
P	Tekanan uap, kPa atau mmHg
P_i^{sat}	Tekanan uap jenuh untuk komponen i
q_i	Parameter area untuk komponen i
r_i	Parameter volume untuk komponen i
R	Konstanta Gas, 0,082057 m ³ atm/(kgmol.K) atau 1,987 cal/mol.K
T	Suhu, °C atau K
V_i	Volume molar untuk komponen i
x_i	Fraksi mol di fase cair saat setimbang untuk komponen i
x^o	Komposisi bahan
y_i	Fraksi mol di fase uap saat setimbang untuk komponen i
z	Parameter persamaan UNIQUAC

Huruf Greek

α	Parameter persamaan NRTL (<i>Non-Randomness factor</i>)
ϕ_i	Koefisien fugasitas komponen murni i
$\hat{\phi}_i$	Koefisien fugasitas komponen i dalam campuran /larutan
γ_i	Koefisien aktifitas komponen i
θ_i	Fraksi Area untuk Komponen i
Φ_i	Fraksi Volume untuk Komponen i
τ_{ij}, τ_{ji}	Konstanta empiris persamaan NRTL
δ^*	Nilai <i>Point Test</i> untuk setiap data
δ	Nilai <i>Point Test</i> untuk seluruh data

Superscript

l	Fase cair (<i>liquid</i>)
v	Fase uap (<i>vapor</i>)
0	Murni (P_1^0 = tekanan uap komponen 1 murni)

Subscript

c	<i>Critical</i>
$calc$	Nilai dari perhitungan
$eksp$	Nilai dari eksperimen
i, j	Komponen ke-
sat	<i>Saturated</i> (jenuh)
$1,2$	Komponen 1,2

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian ini dilakukan dalam beberapa tahapan. Tahapan pertama, yaitu melakukan percobaan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair sistem biner untuk sistem etanol + 2-butanol dan untuk sistem aseton + 2-butanol, serta sistem terner untuk sistem etanol + aseton + 2-butanol pada tekanan 101.33 kPa. Setelah data tersebut diperoleh, dilakukan tes konsistensi termodinamika menggunakan tes luasan. Data yang telah dites konsistensinya, dikorelasikan dengan model persamaan NRTL dan UNIQUAC untuk mendapatkan parameter interaksi.

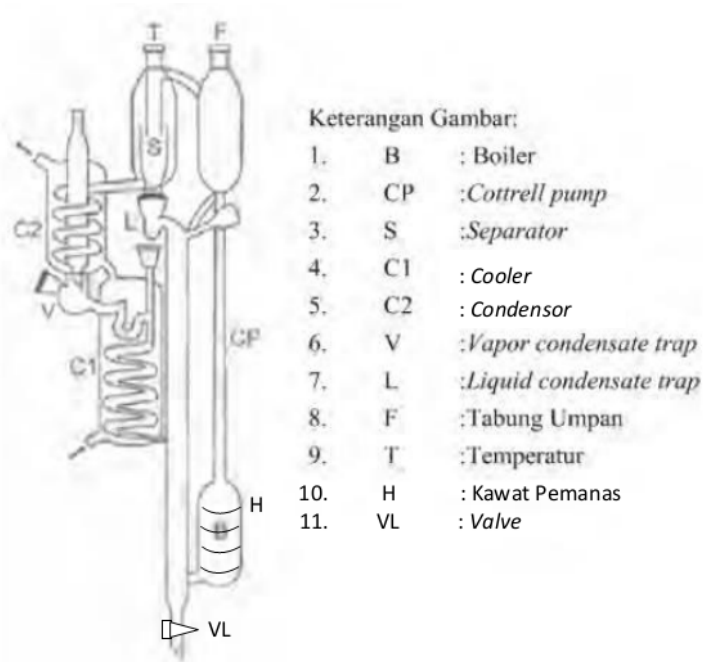
Tahapan kedua yaitu perhitungan korelasi kesetimbangan uap-cair untuk sistem biner dan sistem terner dari parameter interaksi untuk mendapatkan koefisien aktivitas masing-masing komponen, temperatur (T), dan fraksi uap (y). Dan tahapan ketiga, yaitu membandingkan hasil percobaan ini dengan hasil korelasi sehingga dapat dibuat tabel kesetimbangan uap-cair T , x , dan y pada 101.33 kPa.

3.1 Peralatan Percobaan

Alat utama yang digunakan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair pada percobaan ini adalah Ebuliometer termodifikasi seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3.1. Peralatan Ebuliometer yang digunakan terdiri dari tabung umpan yang berfungsi untuk memasukkan umpan, tabung pemanas, pompa kotel, serta tabung kesetimbangan dimana terjadi proses pemisahan. Kondensor digunakan untuk mengkondensasikan fase uap yang dihasilkan dan dilengkapi *cooler* untuk mendinginkan kondensat menjadi liquid untuk di *recycle*.

Percobaan dimulai dengan memasukkan campuran bahan dengan beberapa komposisi tertentu ke dalam tabung boiler (B) hingga penuh, melalui bagian atas tabung umpan (F). Sebelum larutan dipanaskan, air pendingin dialirkan terlebih dahulu dari bagian bawah *cooler* (C1) dan keluar melalui bagian

atas kondensor (C2) sehingga menggunakan sistem aliran *counter-current*. Setelah sistem peralatan siap, larutan dipanaskan hingga mendidih dengan *heater* berupa kawat lilitan yang tersambung dengan rangkaian alat *manual voltage regulator*. Pemanasan larutan mengakibatkan uap dan liquid yang terbentuk akan terdorong naik melalui *Cottrel Pump* (CP) menuju tabung kesetimbangan (S). Gelembung yang terbentuk ketika liquid mendidih masuk ke dalam *Cottrel Pump*. Luas penampang pompa *cottrel* yang cukup kecil menyebabkan tegangan permukaan fase liquid cukup kuat mempertahankan integrasi gelembung, sehingga gelembung tersebut tidak pecah sebelum mencapai tabung kesetimbangan.



Gambar 3.1 Skema Alat Ebulliometer Termodifikasi

Dalam tabung kesetimbangan, fase liquid dan uap akan terpisah dengan desain sekat kaca pemisah. Bagian liquid akan jatuh menuju *liquid fraction condensate trap* (L), yang kemudian akan diambil sebagai sampel fase liquid, dan sisanya jatuh kembali menuju *boiler*. Sedangkan, fase uap akan menuju kondensor (C2), mengembun dan jatuh ke dalam *vapor fraction condensate trap* (V). Hasil kondensat uap di tabung V akan diambil sebagai sampel fase uap, lalu sisanya didinginkan di *cooler* (C1) untuk dididihkan kembali di tabung *boiler* (B). Langkah percobaan ini terus dilakukan sampai temperatur yang terbaca oleh *thermocouple* (T) konstan yang menunjukkan bahwa sistem uap-cair di tabung (S) dalam keadaan setimbang. Setelah sistem mencapai kondisi setimbang, sampel fase cair dan uap diambil, kemudian dianalisa dengan alat *Gas Chromatography* (GC) untuk mengetahui komposisi larutan di dalamnya. Pengaturan tekanan operasi pada percobaan ini dengan desain alat bagian bawah kondensor (C1) terdapat lubang yang menghubungkan tabung (S) dengan udara luar sehingga diperoleh tekanan atmosfer (101.33 kPa).

3.2 Bahan Percobaan

Bahan-bahan yang digunakan pada percobaan ini adalah :

1. Etanol p.a (99.8%) (MERCK)
2. Aseton p.a (99.9%) (MERCK)
3. 2-Butanol p.a (99.0%) (MERCK)

3.3 Variabel Percobaan

Vairabel yang digunakan pada percobaan ini adalah variasi komposisi campuran sistem etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3), serta variasi komposisi campuran sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3). Variasi komposisi campuran dihitung dan dibuat sehingga nantinya diharapkan ada distribusi (penyebaran) data setelah dihitung dan dibuat grafik kesetimbangan T, x, dan y.

3.4 Prosedur Percobaan

3.4.1 Percobaan

Tahap percobaan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair adalah sebagai berikut :

1. Menyusun peralatan Ebuliometer seperti gambar 3.1.
2. Membuat campuran pada sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) untuk berbagai komposisi (mol fraksi).
3. Mengalirkan air pendingin melalui kondensor (C1) dan *cooler* (C2).
4. Memasukkan sampel larutan yang telah diketahui komposisinya ke dalam tabung umpan (F) sampai tabung *boiler* (B) penuh ditandai dengan terendamnya ujung pipa dalam tabung (B).
5. Menjalankan pemanasan pada tabung *bolier* (B) hingga larutan mendidih.
6. Mengamati kesetimbangan yang ditandai dengan stabilnya temperatur yang dibaca pada *thermocouple* (T). Kesetimbangan tercapai saat suhu yang terbaca konstan, maka pengambilan sampel liquid dan uap siap dilakukan.
7. Mengambil sampel fase cair (pada *valve* L) dan fase uap (pada *valve* V).
8. Membuat campuran pada sistem biner aseton (2) + 2-butanol (3) untuk berbagai komposisi dan mengulangi langkah 3-7.
9. Dan membuat campuran pada sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3) untuk berbagai komposisi dan mengulangi langkah 3-7.

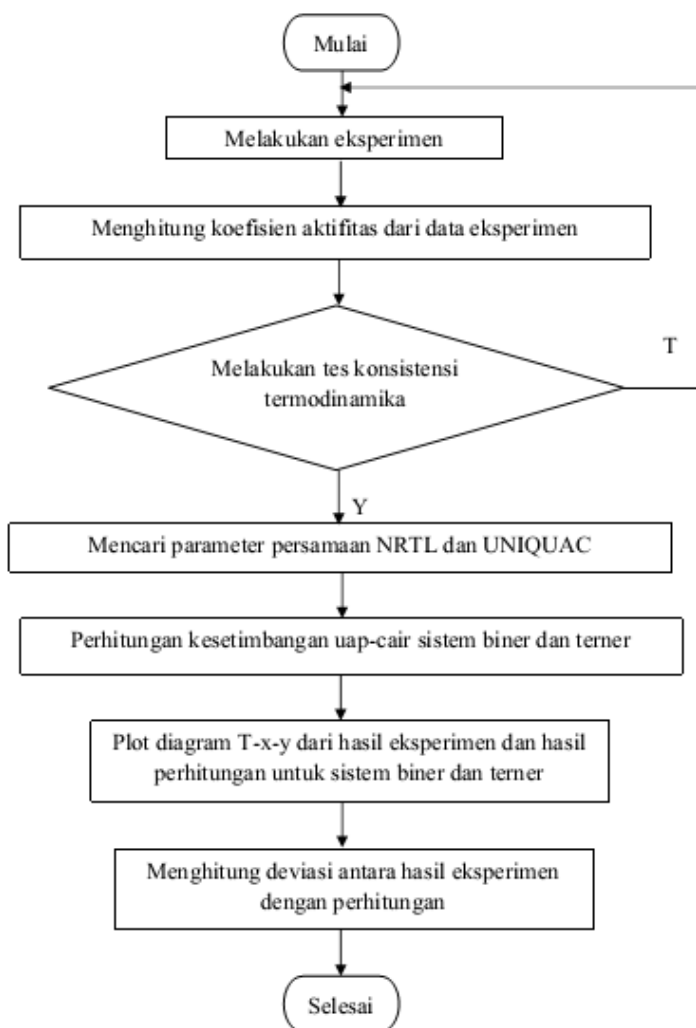
3.4.2 Analisis Hasil Percobaan

Analisa komposisi larutan semua sampel liquid dan uap untuk sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3), serta sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3) dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC). Spesifikasi alat GC yang digunakan yaitu merek *Shimadzu* 2010 dengan detektor TCD menggunakan kolom *Stabilwax*. Sebagai *carrier gas* adalah helium dengan laju alir 15 mL/menit. Analisa

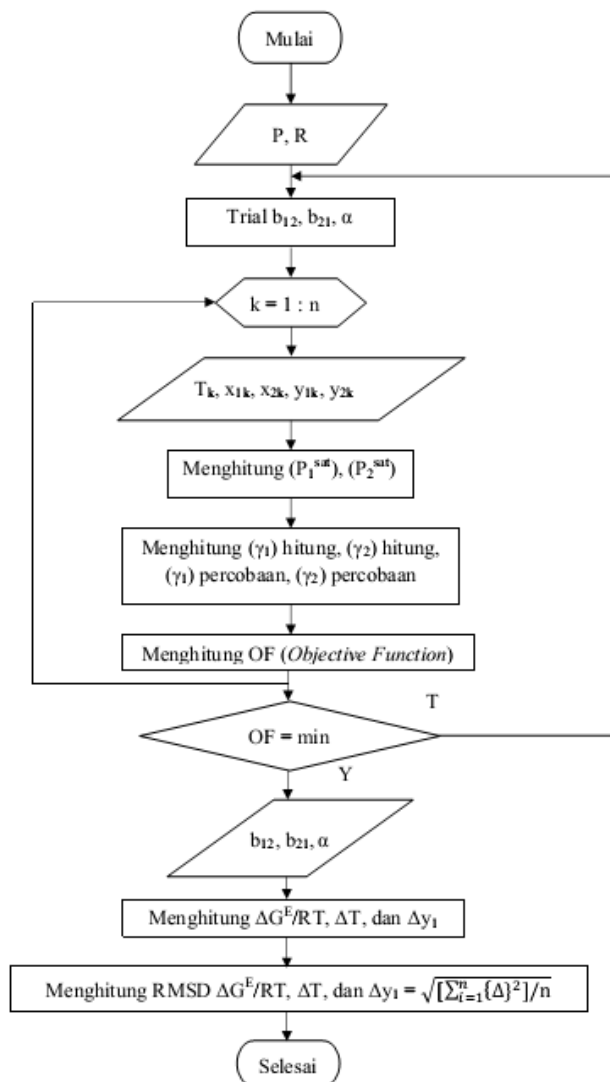
dilakukan dengan mengatur temperatur oven pada keadaan isothermal pada suhu 250°C.

3.5 Diagram Alir Metodologi Percobaan

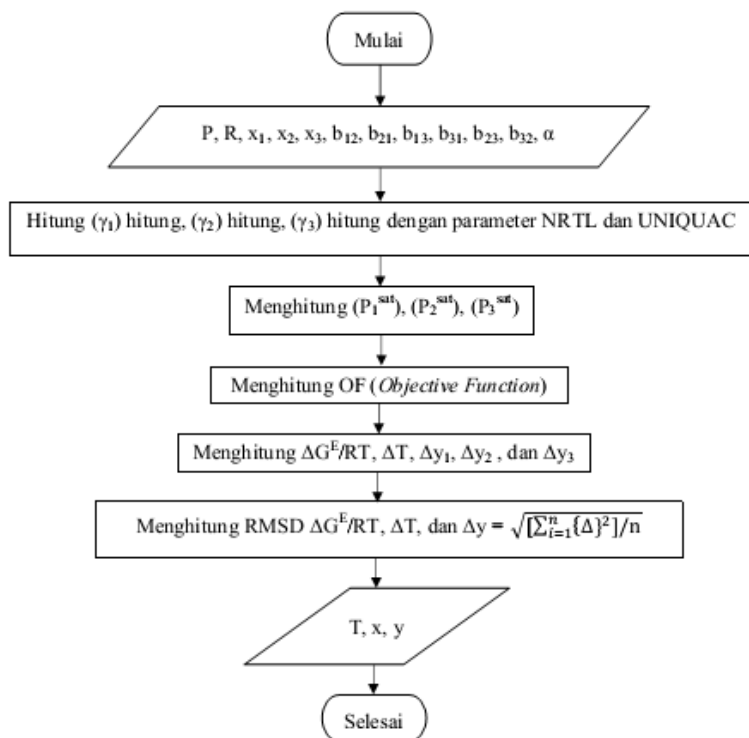
Diagram alir percobaan ini disajikan pada gambar 3.2 sampai 3.4, dimana setelah mendapatkan data eksperimen selanjutnya dilakukan uji konsistensi dari data hasil eksperimen. Setelah data dinyatakan konsisten secara termodinamika, maka selanjutnya parameter dari model NRTL dan UNIQUAC dapat dihitung, kemudian grafik kesetimbangan uap-cair hasil eksperimen dan perhitungan diplot dan dihitung besar deviasinya.



Gambar 3.2 Diagram Alir Metodologi Percobaan



Gambar 3.3 Diagram Alir Perhitungan Parameter Sistem Biner dengan Model NRTL dan UNIQUAC



Gambar 3.4 Diagram Alir Perhitungan Parameter Sistem Ternar dengan Model NRTL dan UNIQUAC

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini menggunakan alat Ebuliometer termodifikasi yang telah dilakukan validasi dahulu agar dapat digunakan. Data eksperimen sistem biner yang telah didapat kemudian dilakukan tes konsistensi termodinamika dan setelah dinyatakan konsisten, maka data tersebut diolah dan dihitung untuk mendapatkan parameter dari persamaan NRTL dan UNIQUAC. Parameter yang telah didapat dari perhitungan data eksperimen sistem biner akan digunakan untuk menghitung besarnya deviasi data eksperimen sistem terner dengan hasil perhitungannya.

4.1 Validasi Alat Percobaan

Dalam penelitian ini dilakukan validasi alat untuk mengukur kelayakan alat dengan cara mengukur suhu uap zat murni larutan etanol (1), aseton (2), 2-butanol (3), serta H₂O dan membandingkan hasilnya dengan persamaan *Antoine* berikut :

$$\log P_i^{sat} \text{ (mmHg)} = A_i - \frac{B_i}{t \text{ (}^\circ\text{C)} + C_i} \quad (4.1)$$

Tabel 4.1 menunjukkan hasil validasi alat dengan konstanta persamaan *Antoine* yang didapat dari literatur (Gmehling dkk, 1988). Validasi dilakukan dengan menghitung RE (*Relative Error*) antara temperatur uap eksperimen dengan persamaan *Antoine* pada tekanan 101.33 kPa (760 mmHg). Persamaan RE (pers. 4.2) sebagai berikut :

$$RE = \left[\frac{t_i^{sat}(\text{Antoine}) - t_i^{sat}(\text{Eksperimen})}{t_i^{sat}(\text{Antoine})} \right] \times 100\% \quad (4.2)$$

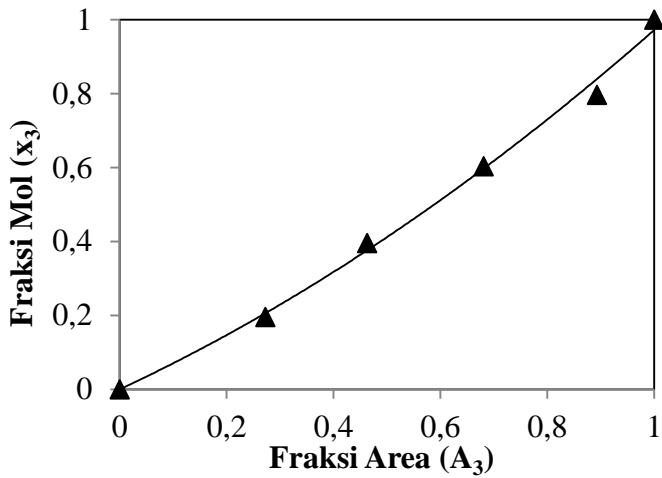
**Tabel 4.1. Hasil Validasi Alat dengan Korelasi terhadap
Persamaan Antoine (Gmehling dkk, 1988)**

Komponen	Konstanta Antoine			t_i^{sat} (°C)	t_i^{sat} (°C) Penelitian	RE (%)
	A	B	C	Antoine		
Etanol (1)	8.1122	1592.864	226.184	78.24	76.2	2.68
Aseton (2)	7.6313	1566.69	273.419	56.20	56.5	0.22
2-Butanol (3)	7.47429	1314.188	186.5	99.50	96.8	2.81
H ₂ O	8.07131	1730.63	233.426	100.00	97.6	2.40

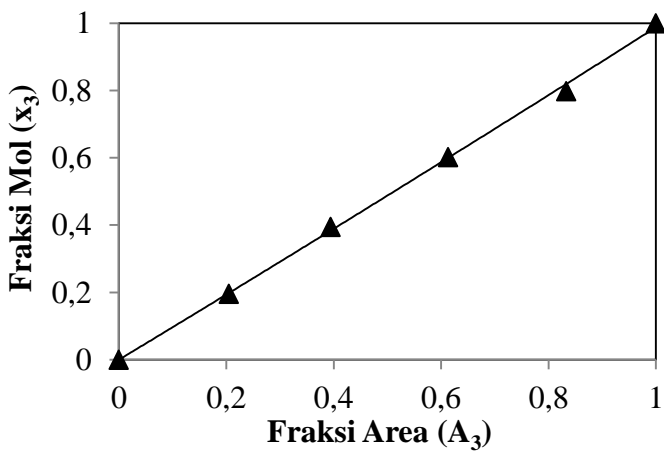
Hasil perhitungan RE untuk validasi alat terhadap suhu uap zat murni larutan yang didapatkan sudah cukup kecil yaitu kurang dari 3% (Tabel 4.1). Oleh karena itu, dapat disimpulkan bahwa Ebuliometer termodifikasi sudah dapat digunakan dalam pengukuran temperatur uap-cair sistem campuran pada variabel penelitian sistem biner maupun sistem terner.

4.2 Kurva Kalibrasi

Dalam penelitian ini juga dilakukan kalibrasi dengan analisa alat *Gas Chromatography* (GC) terhadap variabel penelitian sistem biner maupun terner. Kalibrasinya berupa kurva kalibrasi antara fraksi mol (x) terhadap fraksi area (A). Gambar 4.1 menunjukkan data kurva kalibrasi sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3). Sedangkan Gambar 4.2 berupa data kurva kalibrasi sistem biner aseton (2) + 2-butanol (3). Semua kalibrasi data eksperimen dilakukan pada tekanan 101.33 kPa.



Gambar 4.1. Kurva Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) dengan Analisa GC



Gambar 4.2. Kurva Kalibrasi Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) dengan Analisa GC

4.3 Tes Konsistensi Termodinamika

Data percobaan yang diperoleh dari penelitian tidak bisa langsung diolah, tetapi harus dipastikan dahulu bahwa data percobaan tersebut akurat secara termodinamika sehingga dapat diolah dan diperoleh parameter dari persamaan korelasi yang akurat dan nilai OF (*Objective Function*) seminimal mungkin. Rangkaian data kesetimbangan uap-cair yang diperoleh dari eksperimen disajikan pada Tabel 4.2 dan 4.3, serta hasil eksperimen data jurnal dari Hellwig dan Winkle (1954) untuk sistem biner etanol (1) dan aseton (2), seharusnya konsisten dan memenuhi tes konsistensi termodinamika, dalam hal ini memenuhi persamaan Gibbs-Duhem. Oleh karena itu, untuk data eksperimen sistem biner membutuhkan uji konsistensi termodinamika. Untuk data eksperimen sistem biner etanol (1) + aseton (2) tidak perlu dilakukan tes konsistensi termodinamika karena data diperoleh dari jurnal sehingga dapat dipastikan konsisten.

Penentuan konsistensi dilakukan dengan melakukan plot antara \ln perbandingan koefisien aktifitas dan G^E/RT percobaan terhadap komposisi cair. Menurut Philip dkk, (1994) *trend line* disusun yang paling sesuai dengan $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ dan G^E/RT hasil percobaan dengan menggunakan ekspansi Redlich-Kister. Setelah didapat *trend* persamaan yang paling mewakili distribusi data yang telah diplot kemudian dari plot tersebut dicari nilai-nilai absolut selisih luasan. Seperti yang diajukan oleh Kojima, maka data percobaan harus memenuhi syarat dari tiga metode yaitu metode Tes Luasan (*Area Test*), metode *Point Test*, dan metode *Infinite Dilution Test* sehingga dapat dikatakan konsisten.

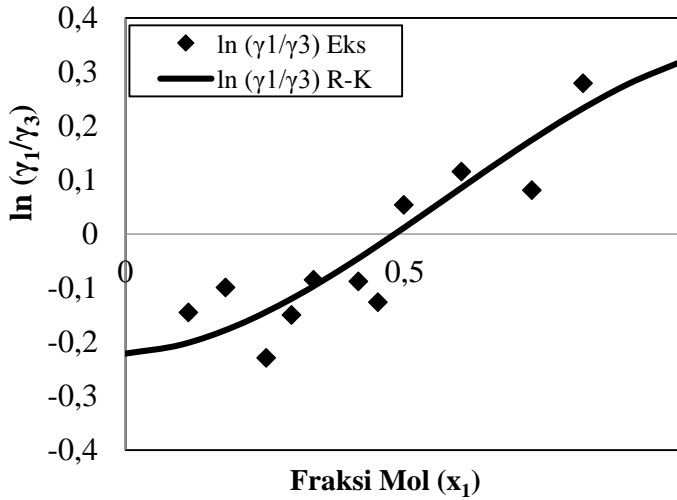
Tabel 4.2. Data Eksperimen Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3)

T (K)	Fraksi Mol			
	x_1	x_3	y_1	y_3
369.95	0.000	1.000	0.000	1.000
367.05	0.113	0.887	0.194	0.806
365.25	0.179	0.821	0.302	0.698
363.25	0.252	0.748	0.371	0.629
361.65	0.297	0.703	0.447	0.553
360.65	0.337	0.663	0.510	0.490
359.45	0.417	0.583	0.594	0.406
358.45	0.452	0.548	0.620	0.380
357.45	0.499	0.501	0.702	0.298
355.35	0.602	0.398	0.793	0.207
353.15	0.728	0.272	0.869	0.131
351.05	0.820	0.180	0.933	0.067
349.35	1.000	0.000	1.000	0.000

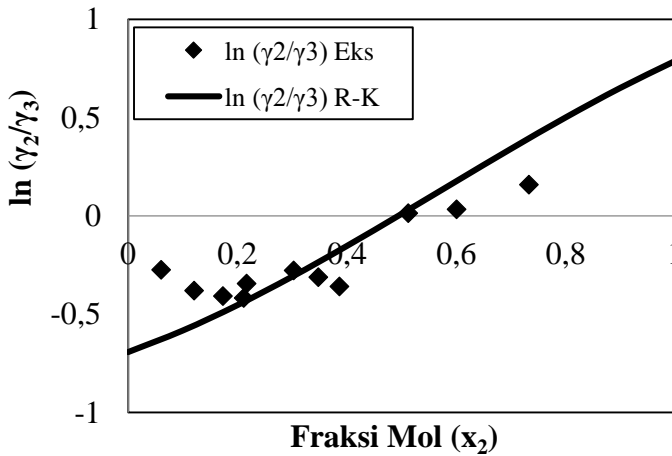
Tabel 4.3. Data Eksperimen Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3)

T (K)	Fraksi Mol			
	x_2	x_3	y_2	y_3
369.95	0.000	1.000	0.000	1.000
365.45	0.061	0.939	0.145	0.855
363.75	0.121	0.879	0.249	0.751
358.85	0.173	0.827	0.344	0.656
356.15	0.211	0.789	0.408	0.592
355.55	0.217	0.783	0.435	0.565
351.05	0.303	0.697	0.579	0.421
346.55	0.348	0.652	0.635	0.365
346.75	0.386	0.614	0.662	0.338
341.15	0.513	0.487	0.838	0.162
337.45	0.601	0.399	0.889	0.111
334.05	0.733	0.267	0.946	0.054
329.65	1.000	0.000	1.000	0.000

Plot hasil perhitungan konsistensi data eksperimen kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) disajikan pada gambar 4.3, sedangkan sistem biner aseton (2) + 2-butanol (3) disajikan pada gambar 4.4. Dimana untuk keseluruhan sistem didapatkan hasil untuk metode *Area Test* < 3%, untuk metode *Point Test* < 5%, dan metode *Infinite Dilution Test* < 30% seperti yang disajikan pada Tabel 4.4. Sehingga data eksperimen dapat dikatakan konsisten.



Gambar 4.3. Grafik Tes Konsistensi Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3)



Gambar 4.4. Grafik Tes Konsistensi Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3)

Tabel 4.4. Hasil Tes Konsistensi Termodinamika

Sistem Biner	Metode				Hasil
	<i>Area Test*</i>	<i>Point Test**</i>	<i>Infinite Dilution Test***</i>		
			I ₁ (%)	I ₂ (%)	
Etanol (1) + 2-Butanol (3)	2.5	3.7	25.1	27.6	Konsisten
Aseton (2) + 2-Butanol (3)	2.3	4.9	24.9	27.1	Konsisten

* *Area Test* (A) < 3%, maka memenuhi syarat.

** *Point Test* (δ) < 5%, maka memenuhi syarat.

*** *Infinite Dilution Test* (I₁ dan I₂) < 30%, maka memenuhi syarat.

Dari data hasil uji konsistensi termodinamika pada tabel 4.4 dapat dilihat bahwa data eksperimen telah memenuhi syarat dari ketiga metode tersebut, sehingga dapat percobaan tersebut dapat dikatakan konsisten dan dapat diolah dan dihitung parameternya dengan korelasi persamaan NRTL dan UNIQUAC.

4.4 Kesenjangan Uap-Cair Isobarik dan Parameter Model UNIQUAC dan NRTL

Eksperimen dilakukan dengan cara mengukur suhu uap-cair campuran sistem biner maupun ternary dengan kondisi isobarik pada tekanan 101.33 kPa dan setimbang. Data-data percobaan yang telah diperoleh dan diuji konsistensinya selanjutnya dikorelasikan dengan model UNIQUAC dan NRTL, sehingga diperoleh parameter optimal dari kedua model tersebut. Sebenarnya ada model persamaan lain yang umum digunakan yaitu model Wilson, namun berdasarkan beberapa penelitian sebelumnya model Wilson kurang akurat dari model NRTL dan UNIQUAC untuk memprediksi sistem biner dan ternary seperti pada sistem etanol + aseton + 2,2,4-trimetilpentana (Ku dan Tu, 2005), sistem ternary etanol + aseton + diisopropil eter (Lee dan

Hu.,1995), serta sistem biner etanol + etil laktat dan 1-butanol + 1-butil laktat (Tejedor dkk., 2005), dan lain-lain. Selain itu, model NRTL dan UNIQUAC merupakan pengembangan dari model Wilson meskipun persamaan Wilson lebih disukai karena lebih sederhana. Sehingga pada penelitian ini hanya menggunakan korelasi dari model NRTL dan UNIQUAC saja karena berdasarkan beberapa penelitian sebelumnya lebih akurat dari model Wilson.

Pada model UNIQUAC optimasi parameter dilakukan pada dua parameter yaitu A_{12} dan A_{21} . Sedangkan pada model NRTL, optimasi hanya dilakukan pada dua parameter yaitu b_{12} dan b_{21} , sedangkan parameter ketiga, α , ditentukan besarnya terlebih dahulu. Pada perhitungan, nilai α ditetapkan sebesar 0.3 karena semua komponen yang digunakan adalah polar (Renon dan Prausnitz., 1968). *Fitting parameter* ini dilakukan dengan meminimkan nilai *Objective Function* (OF) yaitu :

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{cal}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2 \quad (4.3)$$

Root Mean Square Deviation (RMSD) menunjukkan deviasi antara data eksperimen dan model. RMSD G^E/RT digunakan karena G^E/RT merupakan fungsi yang mewakili T dan y, sehingga RMSD G^E/RT akan mewakili RMSD T dan y.

$$RMSD \ G^E/RT = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (G^E/RT_{eksp} - G^E/RT_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.4)$$

$$RMSD \ y = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (y(1)_{eksp} - y(1)_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

$$RMSD \ T = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (T_{eksp} - T_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.6)$$

4.4.1 Kestimbangan Uap-Cair Sistem Biner

Pada kestimbangan uap-cair sistem biner terdapat dua eksperimen yaitu etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3). Dimana pada parameter biner dan RMSD yang telah dioptimasi disajikan pada Tabel 4.5 dengan disertakan juga deviasi dari tekanan dan kestimbangan fase uap.

Tabel 4.5. Korelasi Parameter NRTL dan UNIQUAC terhadap RMSD Suhu dan Komposisi Uap Sistem Biner

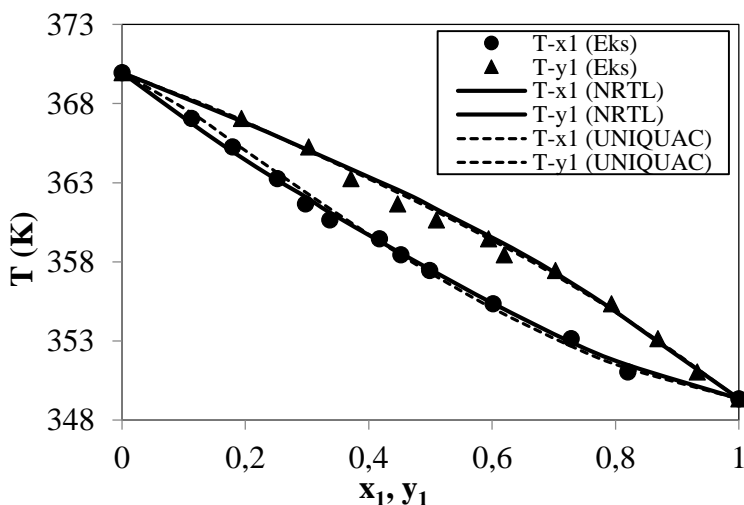
Model	Parameter*			OF	RMSD	
	A _{ij}	A _{ji}	α		T(K)	y ₁
Etanol (1) + 2-Butanol (3)						
- NRTL	484.20	-496.32	0.3	0.074	0.3	0.16
- UNIQUAC	-65.42	-183.80	-	0.017	0.4	0.15
Aseton (2) + 2-Butanol (3)						
- NRTL	-158.1	55.64	0.3	0.602	0.9	0.06
- UNIQUAC	-18.12	-34.99	-	0.385	0.9	0.06
Etanol (1) + Aseton (2)						
- NRTL	473.58	-53.89	0.3	0.054	0.6	0.01
- UNIQUAC	89.33	67.82	-	0.036	0.2	0.01

*Parameter biner untuk model UNIQUAC $A_{ij} = a_{12}$, $A_{ji} = a_{21}$ (K), dan NRTL $A_{ij} = b_{12}$, $A_{ji} = b_{21}$ (cal/mol).

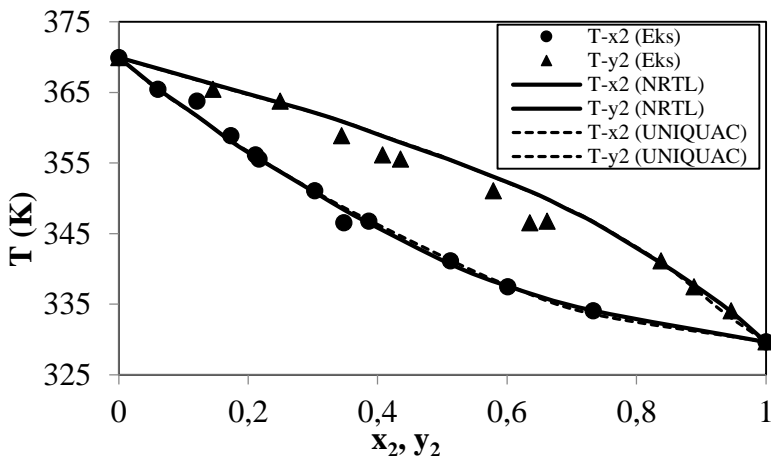
Parameter dioptimasi untuk meminimalisir nilai OF (*Objective Function*) dan dapat dilihat pada tabel bahwa model UNIQUAC memiliki nilai RMSD lebih kecil daripada model NRTL. Berdasarkan deviasi yang ditunjukkan oleh kedua model dimana model UNIQUAC yang lebih mempresentasikan data eksperimen.

Korelasi model ini juga dapat diplot antara komposisi kesetimbangan uap-cairnya dengan temperatur yang seperti pada gambar di bawah ini. Untuk model UNIQUAC dan NRTL bila diplotkan dengan hasil eksperimen dapat disajikan pada Gambar 4.5 dan 4.6.

Selain dari kondisi RMSD eksperimen dengan kedua model yang baik atau bisa dikatakan memiliki deviasi yang kecil, bisa dilihat juga dari plot kesetimbangan uap-cair kedua sistem yang disajikan pada Gambar 4.5 dan 4.6 tampak data eksperimen cukup berhimpit dengan model, sehingga dapat dicermati bahwa model UNIQUAC dan NRTL secara umum dapat merepresentasikan data eksperimen. Selain itu, dapat dilihat juga bahwa model UNIQUAC lebih mempresentasikan data eksperimen daripada model NRTL karena nilai deviasi (RMSD) yang secara umum lebih kecil sehingga lebih akurat untuk ketiga sistem biner.



Gambar 4.5. Grafik $T-x_1-y_1$ Pada Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + 2-Butanol (3) dengan Tekanan 101.33 kPa



Gambar 4.6. Grafik $T-x_2-y_2$ Pada Kesetimbangan Uap-Cair Aseton (2) + 2-Butanol (3) dengan Tekanan 101.33 kPa

4.4.2 Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Terner

Pada kesetimbangan uap-cair sistem terner, eksperimen yang digunakan yaitu etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3). Dalam penggunaan parameter terner, dimana parameter biner untuk sistem etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3) diperoleh dari eksperimen yang telah dilakukan. Sedangkan untuk parameter biner sistem etanol (1) + aseton (2) dihitung dari perhitungan data eksperimen jurnal dari Hellwig dan Winkle (1954). Tabel 4.6 dan Gambar 4.7 menunjukkan data dan grafik hasil eksperimen sistem terner yang telah dilakukan. Sedangkan pada Tabel 4.7 menampilkan data perhitungan untuk masing-masing persamaan korelasi yang didapat dari berbagai sumber yang telah disebutkan di atas.

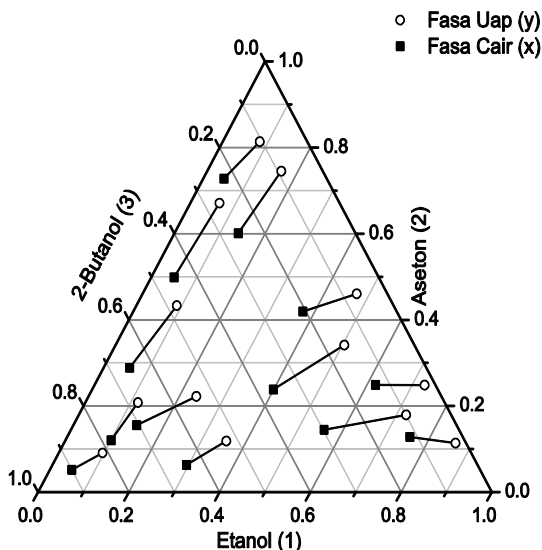
**Tabel 4.6. Data Eksperimen Sistem Terner Etanol (1) +
Aseton (2) + 2-Butanol (3)**

T (K)	Fraksi Mol					
	x ₁	x ₂	x ₃	y ₁	y ₂	y ₃
360.25	0.048	0.052	0.900	0.097	0.091	0.813
358.35	0.101	0.120	0.779	0.116	0.208	0.676
356.25	0.139	0.155	0.705	0.237	0.222	0.540
355.55	0.057	0.288	0.655	0.089	0.433	0.478
351.45	0.296	0.063	0.641	0.356	0.118	0.526
347.45	0.050	0.498	0.451	0.064	0.671	0.265
346.55	0.399	0.238	0.363	0.504	0.341	0.154
345.05	0.046	0.728	0.226	0.082	0.814	0.104
344.05	0.140	0.601	0.259	0.163	0.745	0.091
343.25	0.374	0.419	0.207	0.472	0.460	0.068
341.95	0.558	0.145	0.297	0.722	0.179	0.099
335.65	0.619	0.249	0.132	0.728	0.248	0.024
332.85	0.755	0.128	0.117	0.863	0.114	0.023

**Tabel 4.7. Korelasi Parameter Biner Terhadap RMSD Suhu
dan Komposisi Uap Sistem Terner**

Model		RMSD			
		T (K)	y ₁	y ₂	y ₃
-	NRTL	0,826	0,093	0,110	0,061
-	UNIQUAC	0,902	0,090	0,080	0,042

Berikut ini adalah grafik kesetimbangan uap cair sistem terner dari data percobaan dengan bantuan dari program *software* (ORIGINPro 8) :



Gambar 4.7. Grafik Segitiga x-y Pada Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + Aseton (2) + 2-Butanol (3) dengan Tekanan 101.33 kPa

Parameter ketiga sistem biner yang telah dihitung dan diperoleh dari model NRTL dan UNIQUAC digunakan untuk dikorelasikan dengan sistem terner. Berdasarkan deviasi yang ditunjukkan oleh kedua model pada tabel 4.7 dimana model NRTL yang lebih merepresentasikan data eksperimen sistem terner. Selain itu, dari kondisi RMSD eksperimen dengan kedua model yang baik atau bisa dikatakan memiliki deviasi yang kecil. Sehingga dapat disimpulkan bahwa model UNIQUAC dan NRTL

secara umum dapat merepresentasikan data eksperimen. Selain itu, dapat dilihat juga bahwa model NRTL lebih mempresentasikan data eksperimen daripada model UNIQUAC karena nilai deviasi (RMSD) yang secara umum lebih kecil sehingga lebih akurat untuk sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3).

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)

BAB V

KESIMPULAN

Dari hasil percobaan dan perhitungan yang telah dilakukan, maka diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

1. Data kesetimbangan uap cair isobarik pada tekanan 101.33 kPa telah diperoleh secara eksperimental untuk sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3), aseton (2) + 2-butanol (3), dan sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3).
2. Korelasi data kesetimbangan uap-cair dengan model NRTL dan UNIQUAC memberikan hasil yang baik. Untuk sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) dan aseton (2) + 2-butanol (3) pada tekanan 101.33 kPa, hasil korelasi dengan model NRTL menghasilkan $\text{RMSD } T$ dan y_1 masing-masing sebesar 0.282 dan 0.162; serta 0.891 dan 0.0597, sedangkan model UNIQUAC masing-masing sebesar 0.412 dan 0.153; serta 0.948 dan 0.0582. Dan untuk sistem terner etanol (1) + aseton (2) + 2-butanol (3) pada tekanan 101.33 kPa, hasil korelasi dengan model NRTL menghasilkan $\text{RMSD } T$, y_1 , y_2 , dan y_3 masing-masing sebesar 0.902; 0.09; 0.08; dan 0.042, sedangkan model UNIQUAC masing-masing sebesar 0.786; 0.066; 0.045; dan 0.041.

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)

Tabel A.5. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Area Test*

Parameter					
a	0.025	c	-0.025	A	2.483
b	-0.313	d	0.042		

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	γ ₁ eksp	γ ₃ eksp	ln(γ ₁ /γ ₃) eksp	ln(γ ₁ /γ ₃) calc	(Δln(γ ₁ /γ ₃)) ²
369.95	0	0		1			
367.05	0.113	0.194	0.878	1.015	-0.145	-0.201	0.003
365.25	0.179	0.302	0.922	1.017	-0.099	-0.178	0.006
363.25	0.252	0.371	0.865	1.088	-0.229	-0.144	0.007
361.65	0.297	0.447	0.935	1.087	-0.150	-0.120	0.001
360.65	0.337	0.510	0.976	1.063	-0.085	-0.096	0.000
359.45	0.417	0.594	0.962	1.051	-0.088	-0.045	0.002
358.45	0.452	0.620	0.962	1.091	-0.126	-0.021	0.011
357.45	0.499	0.702	1.026	0.972	0.054	0.012	0.002
355.35	0.602	0.793	1.041	0.928	0.116	0.085	0.001
353.15	0.728	0.869	1.026	0.946	0.081	0.174	0.009
351.05	0.820	0.933	1.063	0.804	0.279	0.233	0.002
349.35	1	1	1			Total	0.044
						RMSD	0.063

Tabel A.6. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Area Test*

Parameter					
a	0.023	c	-0.025	A	2.263
b	-0.783	d	0.043		

T eksp (K)	x ₂ eksp	y ₂ eksp	γ ₂ eksp	γ ₃ eksp	ln(γ ₂ /γ ₃) eksp	ln(γ ₂ /γ ₃) calc	(Δln(γ ₂ /γ ₃)) ²
369.95	0	0		1			
365.45	0.061	0.145	0.822	1.081	-0.274	-0.628	0.125
363.75	0.121	0.249	0.742	1.084	-0.380	-0.557	0.031
358.85	0.173	0.344	0.816	1.226	-0.407	-0.489	0.007
356.15	0.211	0.408	0.856	1.298	-0.417	-0.438	0.000
355.55	0.217	0.435	0.906	1.277	-0.344	-0.430	0.007
351.05	0.303	0.579	0.982	1.296	-0.278	-0.305	0.001
346.55	0.348	0.635	1.072	1.463	-0.312	-0.235	0.006
346.75	0.386	0.662	0.999	1.430	-0.358	-0.174	0.034
341.15	0.513	0.838	1.131	1.114	0.015	0.031	0.000
337.45	0.601	0.889	1.149	1.110	0.034	0.178	0.021
334.05	0.733	0.946	1.117	0.952	0.160	0.395	0.055
329.65	1	1	1			Total	0.288
						RMSD	0.162

Tabel A.7. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Point Test*

Parameter						
B	0.036	D	0.124	δ	3.374	
C	-0.373	E	0.976			

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	(G ^E /RT) eksp	(G ^E /RT) calc	($\Delta G^E/RT$) ²	δ^*
369.95	0	0				0
367.05	0.113	0.194	-0.001	-0.005	1.6E-05	0.153
365.25	0.179	0.302	0.000	0.010	1.1E-04	0.411
363.25	0.252	0.371	0.027	0.025	3.7E-06	0.349
361.65	0.297	0.447	0.039	0.030	7.5E-05	0.227
360.65	0.337	0.510	0.033	0.031	3.5E-06	0.117
359.45	0.417	0.594	0.013	0.024	1.2E-04	0.043
358.45	0.452	0.620	0.030	0.018	1.5E-04	0.141
357.45	0.499	0.702	-0.001	0.009	1.1E-04	0.196
355.35	0.602	0.793	-0.006	-0.006	3.7E-07	0.237
353.15	0.728	0.869	0.004	-0.003	5.0E-05	0.149
351.05	0.820	0.933	0.011	0.015	2.3E-05	0.032
349.35	1	1		Total	0.001	0.411
RMSD					0.008	

Tabel A.8. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Infinite Dillution Test*

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	(GE/RT.x ₁ .x ₃) x ₁ = 0	(GE/RT.x ₁ .x ₃) x ₃ = 0	ln(γ_1/γ_3) x ₁ = 0	ln(γ_1/γ_3) x ₃ = 0	I ₁	I ₃
369.95	0	0	-0.443	0.763	-0.221	0.321	25.089	27.585
349.35	1	1				Syarat	< 30	

Tabel A.9. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Point Test*

Parameter						
B	0.644	D	0.249	δ	4.88	
C	-1.209	E	2.277			

T eksp (K)	x ₂ eksp	y ₂ eksp	(G ^E /RT) eksp	(G ^E /RT) calc	($\Delta G^E/RT$) ²	δ^*
369.95	0	0				0
365.45	0.061	0.145	0.061	0.020	2.E-03	0.961
363.75	0.121	0.249	0.035	0.076	2.E-03	1.478
358.85	0.173	0.344	0.133	0.130	1.E-05	1.521
356.15	0.211	0.408	0.173	0.164	7.E-05	1.353
355.55	0.217	0.435	0.170	0.169	2.E-06	1.246
351.05	0.303	0.579	0.176	0.215	2.E-03	0.844
346.55	0.348	0.635	0.272	0.220	3.E-03	0.345
346.75	0.386	0.662	0.219	0.215	2.E-05	0.027
341.15	0.513	0.838	0.116	0.153	1.E-03	0.516
337.45	0.601	0.889	0.125	0.103	5.E-04	0.750
334.05	0.733	0.946	0.068	0.071	9.E-06	0.632
329.65	1	1		Total	0.010	0.537
RMSD					0.030	

Tabel A.10. Tes Konsistensi Termodinamika Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan *Infinite Dillution Test*

T eksp (K)	x ₂ eksp	y ₂ eksp	(GE/RT.x ₂ .x ₃) x ₂ = 0	(GE/RT.x ₂ .x ₃) x ₃ = 0	ln(γ_2/γ_3) x ₂ = 0	ln(γ_2/γ_3) x ₃ = 0	I ₂	I ₃
369.95	0	0	-0.175	1.960	-0.692	0.788	24.924	27.074
329.35	1	1				Syarat	< 30	

Tabel A.11. Perhitungan Kesimalimbangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan Model NRTL

Parameter			Perhitungan		
α	0.3		R	1.987	cal/(mol.K)
b_{13}	484.2	cal/mol	T_1^{sat}	78.298	°C
b_{31}	-496.32	cal/mol	T_3^{sat}	99.599	°C

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	γ_1 eksp	γ_3 eksp	γ_1 calc	γ_3 calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ calc	y ₃ calc	(Δy_1) ²
369.95	0.00	0.00		1.00	0.874	1.000					369.95		0.00	1.00	
367.05	0.11	0.19	0.88	1.02	0.894	0.999	0.001	-0.014	-0.001	0.000	366.75	0.091	0.20	0.80	0.0001
365.25	0.18	0.30	0.92	1.02	0.905	0.996	0.001	-0.021	0.000	0.000	364.97	0.081	0.31	0.69	0.0000
363.25	0.25	0.37	0.87	1.09	0.917	0.992	0.011	-0.028	0.027	0.003	363.16	0.008	0.41	0.59	0.0016
361.65	0.30	0.45	0.94	1.09	0.925	0.989	0.008	-0.031	0.039	0.005	362.11	0.212	0.47	0.53	0.0006
360.65	0.34	0.51	0.98	1.06	0.931	0.985	0.008	-0.034	0.033	0.004	361.11	0.208	0.52	0.48	0.0001
359.45	0.42	0.59	0.96	1.05	0.944	0.977	0.005	-0.038	0.013	0.003	359.31	0.020	0.61	0.39	0.0003
358.45	0.45	0.62	0.96	1.09	0.949	0.972	0.012	-0.039	0.030	0.005	358.55	0.009	0.65	0.35	0.0008
357.45	0.50	0.70	1.03	0.97	0.956	0.965	0.005	-0.040	-0.001	0.001	357.53	0.007	0.69	0.31	0.0001
355.35	0.60	0.79	1.04	0.93	0.971	0.947	0.005	-0.040	-0.006	0.001	355.36	0.000	0.78	0.22	0.0002
353.15	0.73	0.87	1.03	0.95	0.985	0.918	0.002	-0.034	0.004	0.001	352.93	0.050	0.87	0.13	0.0000
351.05	0.82	0.93	1.06	0.80	0.993	0.892	0.016	-0.026	0.011	0.001	351.48	0.186	0.92	0.08	0.0001
349.35	1.00	1.00	1.00		1.000	0.828			Total	0.026	349.35		1.00	0.00	
OF = 0.0743									RMSD (G ^E /RT)	0.048	Total	0.873		Total	0.004
												RMSD T	0.282	RMSD y ₁	0.162

Tabel A.12. Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan Model NRTL

88

Parameter			Perhitungan		
α	0.3		R	1.987	cal/(mol.K)
b_{23}	-158.099	cal/mol	T_2^{sat}	56.38	°C
b_{32}	55.64	cal/mol	T_3^{sat}	99.599	°C

T eksp (K)	x ₂ eksp	y ₂ eksp	γ ₂ eksp	γ ₃ eksp	γ ₂ calc	γ ₃ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₂ calc	y ₃ calc	(Δy ₂) ²
369.95	0.00	0.00		1.00	0.858	1.000					369.95		0.00	1.00	
365.45	0.06	0.15	0.82	1.08	0.873	0.999	0.010	-0.009	0.061	0.005	365.50	0.002	0.17	0.83	0.001
363.75	0.12	0.25	0.74	1.08	0.888	0.998	0.046	-0.016	0.035	0.003	361.67	4.334	0.32	0.68	0.005
358.85	0.17	0.34	0.82	1.23	0.900	0.995	0.046	-0.022	0.133	0.024	358.10	0.565	0.43	0.57	0.007
356.15	0.21	0.41	0.86	1.30	0.909	0.993	0.059	-0.026	0.173	0.040	355.86	0.087	0.50	0.50	0.008
355.55	0.22	0.44	0.91	1.28	0.910	0.992	0.050	-0.027	0.170	0.039	355.56	0.000	0.51	0.49	0.005
351.05	0.30	0.58	0.98	1.30	0.928	0.985	0.061	-0.033	0.176	0.044	350.86	0.036	0.64	0.36	0.004
346.55	0.35	0.64	1.07	1.46	0.936	0.980	0.125	-0.036	0.272	0.095	348.39	3.401	0.69	0.31	0.004
346.75	0.39	0.66	1.00	1.43	0.944	0.975	0.104	-0.038	0.219	0.066	346.49	0.067	0.74	0.26	0.006
341.15	0.51	0.84	1.13	1.11	0.964	0.957	0.042	-0.040	0.116	0.024	340.68	0.221	0.84	0.16	0.000
337.45	0.60	0.89	1.15	1.11	0.976	0.942	0.046	-0.039	0.125	0.027	337.57	0.015	0.89	0.11	0.000
334.05	0.73	0.95	1.12	0.95	0.989	0.915	0.015	-0.031	0.068	0.010	334.10	0.002	0.94	0.06	0.000
329.65	1.00	1.00	1.00		1.000	0.853			Total	0.376	329.65		1.00	0.00	
OF =							0.6024	RMSD (G ^E /RT)		0.185	Total	8.732	Total		0.039
											RMSD T	0.891	RMSD y ₂		0.060

Tabel A.13. Perhitungan Kesenjangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + Aseton (2) Pada 101.33 kPa dengan Model NRTL

68

Parameter							Perhitungan								
α	0.3						R	1.987	cal/(mol.K)						
b_{12}	473.579	cal/mol					T_1^{sat}	78.298	$^{\circ}\text{C}$						
b_{21}	-53.889	cal/mol					T_2^{sat}	56.38	$^{\circ}\text{C}$						

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	γ_1 eksp	γ_2 eksp	γ_1 calc	γ_2 calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ calc	y ₂ calc	(Δy_1) ²
351.48	1.00	1.00	1.00		1.000	1.821					351.48		1.00	0.00	
348.21	0.94	0.83	1.00	1.64	1.002	1.684	0.001	0.033	0.030	8.3E-06	348.11	0.009	0.83	0.17	3.2E-06
345.37	0.88	0.70	1.02	1.47	1.011	1.557	0.003	0.063	0.067	2.0E-05	345.24	0.016	0.69	0.31	1.6E-04
343.26	0.83	0.62	1.06	1.38	1.022	1.465	0.005	0.085	0.101	2.7E-04	343.26	0.000	0.60	0.40	4.2E-04
339.87	0.72	0.51	1.13	1.27	1.053	1.326	0.006	0.115	0.153	1.4E-03	340.35	0.226	0.48	0.52	5.4E-04
338.37	0.66	0.45	1.16	1.22	1.079	1.257	0.006	0.128	0.164	1.3E-03	338.90	0.273	0.42	0.58	4.2E-04
336.04	0.56	0.36	1.25	1.15	1.133	1.167	0.008	0.138	0.184	2.1E-03	336.87	0.688	0.34	0.66	4.3E-04
333.82	0.42	0.27	1.37	1.08	1.223	1.086	0.011	0.133	0.176	1.9E-03	334.71	0.802	0.25	0.75	3.7E-04
331.82	0.26	0.17	1.51	1.03	1.355	1.031	0.010	0.103	0.132	8.5E-04	332.61	0.633	0.16	0.84	1.3E-04
330.32	0.13	0.08	1.59	1.01	1.498	1.006	0.004	0.056	0.071	2.1E-04	330.95	0.397	0.08	0.92	6.9E-06
329.26	0.00	0.00		1.00	1.649	1.000			Total	8.0E-03	329.26		0.00	1.00	
OF = 0.0543							RMSD G ^E /RT			0.030	Total	3.045		Total	0.002
											RMSD T	0.582		RMSD y ₁	0.011

Tabel A.14. Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan Model UNIQUAC

Parameter			Perhitungan						
z	10		R	1.987	cal/(mol.K)				
A ₁₃	-65.42	cal/mol	I ₁	-1.638	°C	r ₁	2.576	r ₃	2.122
A ₃₁	-183.803	cal/mol	I ₃	-0.355	°C	q ₁	2.588	q ₃	1.968

No	T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	γ ₁ eksp	γ ₃ eksp	γ ₁ calc	γ ₃ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ (cal)	y ₃ (cal)	(Δy ₁) ²
	369.95	0.00	0.00		1.00		1.00					369.95		0.00	1.00	
	367.05	0.11	0.11	0.88	1.02	0.75	1.06	2.3E-02	0.015	-0.001	2.8E-04	367.41	1.3E-01	0.17	0.83	0.0007
	365.25	0.18	0.18	0.92	1.02	0.81	1.07	1.8E-02	0.021	0.000	4.4E-04	365.60	1.2E-01	0.27	0.73	0.0011
	363.25	0.25	0.25	0.87	1.09	0.87	1.08	1.0E-04	0.024	0.027	1.0E-05	363.63	1.4E-01	0.38	0.62	0.0001
	361.65	0.30	0.30	0.94	1.09	0.91	1.08	1.0E-03	0.024	0.039	2.0E-04	362.41	5.8E-01	0.45	0.55	0.0000
	360.65	0.34	0.34	0.98	1.06	0.93	1.07	2.0E-03	0.025	0.033	6.3E-05	361.36	5.0E-01	0.50	0.50	0.0001
	359.45	0.42	0.42	0.96	1.05	0.98	1.06	4.5E-04	0.024	0.013	1.2E-04	359.30	2.2E-02	0.60	0.40	0.0001
	358.45	0.45	0.45	0.96	1.09	1.00	1.04	3.5E-03	0.023	0.030	5.2E-05	358.44	4.1E-05	0.64	0.36	0.0006
	357.45	0.50	0.50	1.03	0.97	1.02	1.02	2.8E-03	0.021	-0.001	5.1E-04	357.33	1.5E-02	0.69	0.31	0.0001
	355.35	0.60	0.60	1.04	0.93	1.05	0.97	2.1E-03	0.017	-0.006	5.1E-04	355.06	8.5E-02	0.79	0.21	0.0000
	353.15	0.73	0.73	1.03	0.95	1.06	0.89	4.9E-03	0.011	0.004	4.7E-05	352.68	2.2E-01	0.88	0.12	0.0002
	351.05	0.82	0.82	1.06	0.80	1.05	0.82	5.6E-04	0.006	0.011	1.7E-05	351.28	5.1E-02	0.93	0.07	0.0000
	349.35	1.00	1.00	1.00		1.00				Total	2.2E-03	349.35		1.00	0.00	
	OF = 0.017								RMSD G ^E /RT	0.014	Total	1.870	Total	0.003		
											RMSD T	0.412	RMSD y ₁	0.016		

Tabel A.15. Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa dengan Model UNIQUAC

Parameter			Perhitungan						
z	10		R	1.987	cal/(mol.K)				
A ₂₃	-18.122	cal/mol	I ₂	-0.386	°C	r ₂	2.574	r ₃	2.122
A ₃₂	-34.993	cal/mol	I ₃	-0.355	°C	q ₂	2.336	q ₃	1.968

91

T eksp (K)	x ₂ eksp	y ₂ eksp	γ ₂ eksp	γ ₃ eksp	γ ₂ calc	γ ₃ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₂ calc	y ₃ calc	(Δy ₂) ²
369.95	0.00	0.00		1.00		1.00					369.95		0.00	1.00	
365.45	0.06	0.15	0.82	1.08	0.89	1.01	1.2E-02	0.005	0.061	0.003	365.38	5.5E-03	0.17	0.83	8.3E-04
363.75	0.12	0.25	0.74	1.08	0.91	1.02	5.5E-02	0.010	0.035	0.001	361.63	4.5E+00	0.32	0.68	5.1E-03
358.85	0.17	0.34	0.82	1.23	0.92	1.03	4.2E-02	0.013	0.133	0.015	358.16	4.7E-01	0.43	0.57	7.3E-03
356.15	0.21	0.41	0.86	1.30	0.93	1.04	4.8E-02	0.014	0.173	0.025	356.01	1.8E-02	0.50	0.50	8.2E-03
355.55	0.22	0.44	0.91	1.28	0.93	1.04	3.6E-02	0.015	0.170	0.024	355.60	2.8E-03	0.51	0.49	5.2E-03
351.05	0.30	0.58	0.98	1.30	0.95	1.05	3.8E-02	0.017	0.176	0.025	350.98	4.5E-03	0.63	0.37	3.1E-03
346.55	0.35	0.64	1.07	1.46	0.96	1.05	9.0E-02	0.018	0.272	0.065	348.70	4.6E+00	0.69	0.31	2.9E-03
346.75	0.39	0.66	1.00	1.43	0.97	1.05	7.1E-02	0.019	0.219	0.040	346.90	2.3E-02	0.73	0.27	4.6E-03
341.15	0.51	0.84	1.13	1.11	0.99	1.06	1.9E-02	0.019	0.116	0.009	341.22	4.7E-03	0.83	0.17	3.0E-05
337.45	0.60	0.89	1.15	1.11	0.99	1.05	2.1E-02	0.018	0.125	0.012	337.66	4.6E-02	0.88	0.12	2.9E-05
334.05	0.73	0.95	1.12	0.95	1.00	1.04	2.0E-02	0.014	0.068	0.003	333.57	2.3E-01	0.94	0.06	6.2E-05
329.65	1.00	1.00	1.00		1.00				Total	0.221	329.65		1.00	0.00	
OF =							0.017		RMSD G ^E /RT	0.014	Total	1.870		Total	0.003
											RMSD T	0.412		RMSD y ₁	0.016

Tabel A.16. Perhitungan Kesenjangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + Aseton (2) Pada 101.33 kPa dengan Model UNIQUAC

Parameter			Perhitungan						
z	10		R	1.987	cal/(mol.K)				
A ₁₂	39.328	cal/mol	I ₁	-1.638	°C	r ₁	2.576	r ₂	2.574
A ₂₁	67.823	cal/mol	I ₂	-0.386	°C	q ₁	2.588	q ₂	2.336

92	T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	γ ₁ eksp	γ ₂ eksp	γ ₁ calc	γ ₂ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ calc	y ₂ calc	(Δy ₁) ²
	351.5	1.00	1.00	1.00		1.00						351.48		1.00	0.00	
	348.2	0.94	0.83	1.00	1.64	1.01	1.51	7.2E-03	0.029	0.030	4.1E-07	348.26	3.2E-03	0.84	0.16	2.1E-04
	345.4	0.88	0.70	1.02	1.47	1.02	1.44	6.2E-04	0.058	0.067	8.4E-05	345.50	1.7E-02	0.71	0.29	3.6E-05
	343.3	0.83	0.62	1.06	1.38	1.03	1.38	7.0E-04	0.081	0.101	4.1E-04	343.46	3.8E-02	0.62	0.38	2.3E-05
	339.9	0.72	0.51	1.13	1.27	1.06	1.29	3.3E-03	0.117	0.153	1.3E-03	340.26	1.5E-01	0.49	0.51	2.2E-04
	338.4	0.66	0.45	1.16	1.22	1.10	1.24	3.3E-03	0.134	0.164	8.9E-04	338.60	5.4E-02	0.43	0.57	2.4E-04
	336.0	0.56	0.36	1.25	1.15	1.16	1.17	5.0E-03	0.154	0.184	9.1E-04	336.27	5.4E-02	0.35	0.65	3.1E-04
	333.8	0.42	0.27	1.37	1.08	1.28	1.10	4.3E-03	0.159	0.176	2.8E-04	333.85	1.0E-03	0.26	0.74	2.1E-04
	331.8	0.26	0.17	1.51	1.03	1.49	1.04	1.3E-04	0.134	0.132	4.2E-06	331.67	2.3E-02	0.17	0.83	1.2E-06
330.3	0.13	0.08	1.59	1.01	1.76	1.01	1.1E-02	0.079	0.071	6.8E-05	330.17	2.1E-02	0.09	0.91	8.1E-05	
329.3	0.00	0.00		1.00		1.00			Total	0.004	329.26		0.00	1.00		
OF = 0.036									RMSD G ^E /RT		0.021	Total	0.360		Total	0.001
												RMSD T	0.200		RMSD y ₁	0.012

Tabel A.17. Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Ternern Etanol (1) + Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa Model NRTL

Parameter								
α	0.3							
b_{13}	484.2	cal/mol	b_{23}	-158.099	cal/mol	b_{12}	473.579	cal/mol
b_{31}	-496.32	cal/mol	b_{32}	55.64	cal/mol	b_{21}	-53.889	cal/mol

93

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	y ₂ eksp	γ ₁ calc	γ ₂ calc	γ ₃ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ calc	y ₂ calc	(Δy ₁) ²	(Δy ₂) ²	(Δy ₃) ²	
360.25	0.05	0.10	0.09	0.90	0.87	2.47	0.92	0.80	0.24	3.E-01	361.68	2.03	0.04	0.09	3.E-03	2.E-05	4.E-03	
358.35	0.10	0.12	0.21	0.94	0.88	2.17	0.42	0.58	0.18	2.E-01	359.73	1.90	0.09	0.21	5.E-04	5.E-06	4.E-04	
356.25	0.14	0.24	0.22	0.97	0.89	2.00	0.49	0.47	0.16	9.E-02	357.07	0.67	0.13	0.28	1.E-02	3.E-03	3.E-03	
355.55	0.06	0.09	0.43	1.03	0.92	1.86	0.34	0.38	0.07	1.E-01	354.50	1.09	0.05	0.49	1.E-03	3.E-03	5.E-04	
351.45	0.30	0.36	0.12	0.94	0.86	1.91	0.04	0.39	0.38	1.E-04	351.71	0.07	0.31	0.12	2.E-03	2.E-06	3.E-03	
347.45	0.05	0.06	0.67	1.17	0.95	1.46	0.08	0.15	0.06	9.E-03	347.66	0.05	0.04	0.76	5.E-04	8.E-03	5.E-03	
346.55	0.40	0.50	0.34	1.05	0.86	1.30	0.10	0.08	0.14	3.E-03	345.48	1.15	0.40	0.40	1.E-02	4.E-03	1.E-03	
345.05	0.05	0.08	0.81	1.35	0.97	1.11	0.32	0.02	-0.18	4.E-02	344.79	0.07	0.03	0.91	2.E-03	1.E-02	3.E-03	
344.05	0.14	0.16	0.75	1.25	0.93	1.12	0.06	0.02	-0.08	1.E-02	343.53	0.27	0.11	0.81	3.E-03	5.E-03	3.E-04	
343.25	0.37	0.47	0.46	1.14	0.86	1.01	0.13	-0.01	0.04	3.E-03	342.12	1.27	0.33	0.60	2.E-02	2.E-02	2.E-06	
341.95	0.56	0.72	0.18	1.02	0.84	1.21	0.19	0.04	0.31	7.E-02	341.26	0.47	0.59	0.25	2.E-02	6.E-03	4.E-03	
335.65	0.62	0.73	0.25	1.06	0.81	0.89	0.26	-0.03	0.38	2.E-01	334.42	1.52	0.58	0.37	2.E-02	2.E-02	4.E-04	
332.85	0.76	0.86	0.11	1.02	0.82	0.91	0.32	-0.02	0.60	4.E-01	332.70	0.02	0.75	0.21	1.E-02	9.E-03	4.E-04	
OF =							3.668	Total		0.723	Total	10.577	Total		0.106	0.083	0.023	
								RMSD G ^E /RT	0.236		RMSD T	0.902		RMSD y	0.090		0.080	0.042

Tabel A.18. Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Ternern Etanol (1) + Aseton (2) + 2-Butanol (3) Pada 101.33 kPa Model UNIQUAC

Parameter								
Z	10		R	1.987		cal/(mol.K)		
A ₁₃	-65.42	cal/mol	A ₂₃	-18.122	cal/mol	A ₁₂	39.328	cal/mol
A ₃₁	-183.803	cal/mol	A ₃₂	-34.993	cal/mol	A ₂₁	67.823	cal/mol

T eksp (K)	x ₁ eksp	y ₁ eksp	y ₂ eksp	y ₁ calc	y ₂ calc	y ₃ calc	OF	(G ^E /RT) calc	(G ^E /RT) eksp	$\left(\frac{\Delta G^E}{RT}\right)^2$	T calc (K)	(ΔT) ²	y ₁ calc	y ₂ calc	(Δy ₁) ²	(Δy ₂) ²	(Δy ₃) ²
360.25	0.05	0.10	0.09	1.02	0.88	1.00	0.18	-0.01	0.24	0.06	361.05	0.63	0.09	0.15	1E-05	3E-03	3E-03
358.35	0.10	0.12	0.21	0.84	0.83	1.00	0.10	-0.04	0.18	0.05	357.37	0.96	0.14	0.29	6E-04	7E-03	1E-02
356.25	0.14	0.24	0.22	1.00	0.79	1.00	0.18	-0.04	0.16	0.04	356.55	0.09	0.21	0.33	9E-04	1E-02	7E-03
355.55	0.06	0.09	0.43	1.03	0.89	1.00	0.18	-0.03	0.07	0.01	355.86	0.10	0.07	0.59	3E-04	3E-02	2E-02
351.45	0.30	0.36	0.12	0.51	0.65	1.00	0.57	-0.22	0.38	0.36	352.18	0.53	0.30	0.14	3E-03	3E-04	2E-03
347.45	0.05	0.06	0.67	1.01	0.92	0.99	0.21	-0.05	0.06	0.01	346.74	0.51	0.04	0.80	5E-04	2E-02	1E-02
346.55	0.40	0.50	0.34	1.01	0.59	1.00	0.18	-0.12	0.14	0.07	346.10	0.20	0.49	0.32	3E-04	3E-04	1E-03
345.05	0.05	0.08	0.81	1.25	0.93	0.99	0.35	-0.04	-0.18	0.02	344.13	0.85	0.03	0.92	2E-03	1E-02	3E-03
344.05	0.14	0.16	0.75	1.58	0.82	0.99	0.01	-0.05	-0.08	0.00	343.71	0.11	0.16	0.77	7E-05	7E-04	3E-04
343.25	0.37	0.47	0.46	1.02	0.62	0.99	0.15	-0.20	0.04	0.06	343.60	0.12	0.39	0.53	8E-03	4E-03	4E-04
341.95	0.56	0.72	0.18	1.01	1.03	1.00	0.24	0.01	0.31	0.09	343.69	3.02	0.57	0.30	2E-02	2E-02	8E-04
335.65	0.62	0.73	0.25	1.01	1.03	1.00	0.39	0.01	0.38	0.14	334.41	1.55	0.51	0.45	5E-02	4E-02	4E-04
332.85	0.76	0.86	0.11	1.00	1.04	1.00	0.41	0.01	0.60	0.35	332.41	0.19	0.70	0.25	3E-02	2E-02	5E-04
OF = 3.160									Total	0.623	Total	8.867	Total		0.113	0.156	0.061
									RMSD G ^E /RT	0.219	RMSD T	0.826	RMSD y		0.093	0.110	0.069

APENDIKS

A. Sistem Biner

A.1. Perhitungan Mol Setiap Komponen Dalam Sampel

Bahan yang akan dicampur diambil dari contoh perhitungan sampel sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) pada tekanan 101.33 kPa. Diketahui data sebagai berikut :

1) Etanol

- Densitas = 0.789 gram/mL
- Berat Molekul = 46.07 g/mol
- % Larutan = 99.8%

2) 2-Butanol

- Densitas = 0.8063 gram/mL
- Berat Molekul = 74.122 g/mol
- % Larutan = 99%

Berikut adalah langkah-langkah dalam pembuatan sampel larutan :

- 1) Menentukan komposisi dalam mol fraksi
- 2) Menetapkan awal basis mol fraksi = 1 tiap komposisi
- 3) Menghitung mol masing-masing komponen berdasarkan komposisinya.
- 4) Menghitung massa masing-masing komponen berdasarkan komposisinya.
- 5) Menghitung volume masing-masing komponen berdasarkan komposisinya.
- 6) Menjumlah volume total.
- 7) Melakukan trial dan error basis mol total tiap komponen dengan bantuan *Goal Seek* pada Microsoft Excell untuk memperoleh volume total 60 mL (volume liquid pada tabung pemanas)

Misal perhitungan sampel kurva kalibrasi alat GC untuk fraksi mol 0.8 etanol :

Komposisi	= 0.8 fraksi mol etanol
Basis	= 0.1 gmol total
Mol etanol	= Basis x Komposisi = $0.1 \times 0.8 = 0.08$ gmol
Mol 2-butanol	= Basis x (1-Komposisi) = $0.1 \times (1-0.8) = 0.02$ gmol
Massa etanol	= mol etanol x BM etanol = $0.08 \text{ gmol} \times 0.789 \text{ gram/ml}$ = 3.6856 gram
Massa 2-butanol	= mol 2-butanol x BM 2-butanol = $0.02 \text{ gmol} \times 0.8063 \text{ gram/ml}$ = 1.4824 gram
Volume etanol	= massa etanol / ρ etanol = $3.6856 \text{ gram} / 0.789 \text{ gram/mL}$ = 4.67 mL
Volume 2-butanol	= massa 2-butanol / ρ 2-butanol = $1.4824 \text{ gram} / 0.8063 \text{ gram/mL}$ = 1.84 mL
Volume total	= Volume etanol + Volume 2-butanol = $4.67 \text{ mL} + 1.83 \text{ mL}$ = 6.5 mL

Karena volume yang diinginkan adalah 60 mL, maka dilakukan *Goal Seek* supaya volumenya mencapai 60 mL dengan melakukan trial dan error pada basis mol total komponen. Selain itu juga, dalam membuat larutan sampel tetap menggunakan mol masing-masing komponen untuk memperoleh komposisi yang diinginkan. Dengan cara yang sama diperoleh massa untuk masing-masing komponen dalam setiap sampel yang kemudian akan digunakan untuk pembuatan kurva kalibrasi analisa GC. Begitu juga dalam penggunaan pembuatan sampel eksperimen untuk menghitung kesetimbangan dengan model NRTL dan UNIQUAC.

A.2. Hasil Analisa Eksperimen dengan Menggunakan *Gas Chromatography* (GC)

Sampel-sampel dianalisa dengan menggunakan *Gas Chromatography* (GC) untuk diketahui komposisi persen massa tiap-tiap komponen. Setelah diperoleh data persen massa tiap-tiap komponen, kemudian dapat dihitung fraksi mol tiap komponen pada setiap sampel. Berikut ini adalah merupakan prosedur yang digunakan untuk memperoleh komposisi tiap sampel eksperimen menggunakan alat GC :

1. Kalibrasi

- 1) Membuat larutan etanol (1) + 2-butanol (3) dengan komposisi yang sudah diketahui.
- 2) Mengecek *retention time* untuk komponen murni etanol (1) + 2-butanol (3).
- 3) Menganalisa larutan etanol (1) + 2-butanol (3) dengan berbagai komposisi yang diketahui dengan menggunakan GC.
- 4) Penentuan luas area etanol (1) + 2-butanol (3) berdasarkan *retention time*-nya.
- 5) Plot grafik antara $\frac{A_3}{A_3 + A_1}$ vs x_3 , lalu mencari *trend line* yang tepat

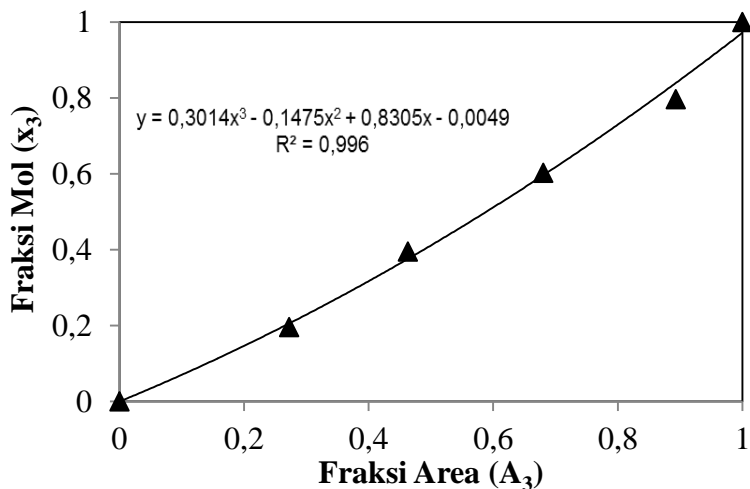
2. Analisa Sampel

- 1) Sampel dianalisa dengan volume yang dimasukkan dalam GC sebesar $1 \mu\text{m}^3$
- 2) Untuk menentukan *peak* yang merupakan representasi dari etanol (1) + 2-butanol (3) dilihat dari *retention time*-nya.
- 3) menghitung nilai $\frac{A_3}{A_3 + A_1}$
- 4) Dari kurva kalibrasi substitusi diperoleh ke persamaan *trend line* sehingga diperoleh rasio fraksi mol yang selanjutnya akan diperoleh fraksi masing-masing.

Contoh hasil perhitungan dan grafik untuk sistem biner etanol (1) + 2-butanol (3) sebagai berikut :

Tabel A.1. Hasil Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) Analisa GC

Kalibrasi						
x_1	x_3	V_1 (mL)	V_3 (mL)	A_1	A_3	$A_3/(A_3+A_1)$
1.0	0.0	5.8	0.0	4297368	0	0.00
0.8	0.2	4.7	1.8	2982990	1116753	0.27
0.6	0.4	3.5	3.6	1783497	1538343	0.46
0.4	0.6	2.3	5.5	1121990	2391663	0.68
0.2	0.8	1.2	7.4	380931	3184484	0.89
0.0	1.0	0.0	9.2	0	4793727	1.00



Gambar A.1. Kurva Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3) dengan Analisa GC

Dengan cara yang sama maka dapat dibuat kurva kalibrasi untuk sistem biner aseton (2) + 2-butanol (3), sehingga setelah disubstitusi ke persamaan *trend line* yang diperoleh, akan didapat fraksi mol tiap komponen dalam sampel seperti berikut :

Tabel A.2. Data Analisa Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3)

T (°C)	Fraksi Mol			
	x_1	x_3	y_1	y_3
96.8	0.000	1.000	0.000	1.000
93.9	0.113	0.887	0.194	0.806
92.1	0.179	0.821	0.302	0.698
90.1	0.252	0.748	0.371	0.629
88.5	0.297	0.703	0.447	0.553
87.5	0.337	0.663	0.510	0.490
86.3	0.417	0.583	0.594	0.406
85.3	0.452	0.548	0.620	0.380
84.3	0.499	0.501	0.702	0.298
82.2	0.602	0.398	0.793	0.207
80.0	0.728	0.272	0.869	0.131
77.9	0.820	0.180	0.933	0.067
76.2	1.000	0.000	1.000	0.000

A.3. Perhitungan Validasi Alat

Dengan membuat perhitungan dari validasi alat ini tujuannya untuk mengetahui alat yang akan digunakan dalam eksperimen telah berada dalam kondisi akurat dan dapat digunakan dengan baik. Langkah perhitungannya adalah sebagai berikut :

1. Validasi Alat dengan Pengukuran Suhu Uap Murni

- Validasi suhu uap murni suatu larutan menggunakan persamaan *Antoine*, sebagai berikut :

$$\log P_i^{\text{sat}} (\text{mmHg}) = A_i - \frac{B_i}{T (^{\circ}\text{C}) + C_i} \quad (4.3)$$

Dimana, P (mmHg) dan T (K), serta perhitungan *relative error*-nya yang didapatkan harus sangat kecil, agar mendekati hasil yang akurat, persamaannya sebagai berikut :

$$RE = \left[\frac{T_i^{\text{sat}}(\text{Antoine}) - T_i^{\text{sat}}(\text{Eksperimen})}{T_i^{\text{sat}}(\text{Antoine})} \right] \times 100\% \quad (4.4)$$

- Contoh perhitungan pada suhu uap murni air, dari persamaan (4.3), dimana data yang diketahui sebagai berikut:

$$A_i = 8.07131$$

$$B_i = 1730.63$$

$$C_i = 233.426$$

$$P_i^{\text{sat}} = 101.33 \text{ kPa} = 760 \text{ mmHg (Antoine)}$$

$$T_i^{\text{sat}} = 97.6 ^{\circ}\text{C (Eksperimen)}$$

$$T_i \text{ Antoine } (^{\circ}\text{C}) = \frac{1730.63}{8.07131 - \log 760} - 233.426$$

$$T_i \text{ Antoine } (^{\circ}\text{C}) = 100 ^{\circ}\text{C}$$

Dari persamaan (4.4), maka didapatkan :

$$RE (T/^{\circ}\text{C}) = \left[\frac{100 - 97.6}{100} \right] \times 100\% = 2.40 \%$$

Berikut adalah hasil korelasi perhitungan masing-masing larutan terhadap persamaan *Antoine* :

Tabel A.3. Hasil Perhitungan Validasi Alat

Komponen	Konstanta <i>Antoine</i>			t_i^{sat} (°C) <i>Antoine</i>	t_i^{sat} (°C) Penelitian	RE (%)
	A	B	C			
Etanol (1)	8.1122	1592.864	226.184	78.24	76.2	2.68
Aseton (2)	7.6313	1566.69	273.419	56.20	56.5	0.22
2-Butanol (3)	7.47429	1314.188	186.5	99.50	96.8	2.81
H ₂ O	8.07131	1730.63	233.426	100.00	97.6	2.40

*Data konstanta dari Gmehling dkk, 1988.

Hasil korelasi data eksperimen pengukuran suhu uap menghasilkan nilai RE (%) masing-masing yang kurang dari 3%. Sehingga alat siap digunakan untuk mendapatkan hasil yang akurat.

A.4. Perhitungan Tes Konsistensi Thermodinamika dengan Metode Tes Luasan

Dengan membuat plot grafik antara $\ln (\gamma_1/\gamma_2)$ dan eksperimen terhadap G^E/RT x_1 kemudian menghitung nilai luas (A), *Point Test* (δ), dan *Infinite Dilution Test* (I_1 dan I_2). Data dikatakan konsisten bila nilai $A < 3\%$, nilai $\delta < 5\%$, nilai I_1 dan $I_2 < 30\%$. Langkah perhitungan untuk ketiga metode adalah sebagai berikut :

A.4.1. Metode Luasan (*Area Test*)

1. Data yang diketahui :

- Misal diambil data dari sistem biner pada etanol (1) + 2-butanol (3) :
 - P = 101.33 kPa
 - T = 80 °C

- $x_1 = 0.728$; $x_3 = 0.272$
- $y_1 = 0.869$
- $P_i^{\text{sat}} = 108.314$

2. Menghitung γ_1 (eksperimen) dan γ_3 (eksperimen) dengan rumus hukum Raoult modifikasi dengan asumsi gas ideal karena tekanan rendah ($\phi = 1$), dimana $i = 1, 2, \dots, n$:

$$\gamma_i (\text{eksperimen}) = \frac{y_i P}{x_i P_i^{\text{sat}}}$$

$$\gamma_1 (\text{eksperimen}) = \frac{(0.869)(101.33)}{(0.728)(108.314)} = 1.0265$$

Dengan cara yang sama didapatkan :

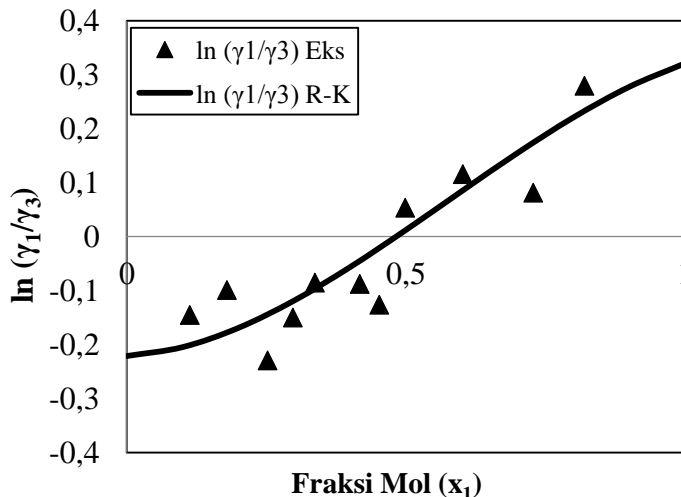
$$\gamma_3 (\text{eksperimen}) = 0.946$$

3. Menghitung $\ln (\gamma_1/\gamma_3)$ eksperimen :

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} (\text{eksperimen}) = \ln \left(\frac{1.0265}{0.946} \right) = 0.0814$$

Dengan cara yang sama didapatkan $\ln (\gamma_1/\gamma_3)$ eksperimen untuk tiap kondisi T (eksperimen) dan x_1 (eksperimen).

4. Melakukan plot grafik antara $\ln (\gamma_1/\gamma_3)$ eksperimen dan x_1 :



Gambar A.2. Grafik Tes Konsistensi Sistem Biner Etanol (1) + 2-Butanol (3)

5. Menghitung koefisien persamaan ekspansi Redlich-Kister :

1) Persamaan Redlich-Kister :

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} = a + b(x_3 - x_1) + c(6x_3x_1 - 1) + d(x_3 - x_1)(1 - 8x_1x_3)$$

*nilai a, b, c, dan d mula-mula dilakukan trial.

2) Menghitung $\ln(\gamma_1/\gamma_3)$:

Asumsi awal :

a = 1; b = 1; c = 1; d = 1, maka :

$$\begin{aligned} \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} &= 1 + 1(0.272 - 0.728) \\ &\quad + 1(6(0.272)(0.728) - 1) \\ &\quad + 1(0.272 - 0.728)(1 - 8(0.728 - 0.272)) \\ \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} &= 0.998 \end{aligned}$$

3) Menghitung RMSD :

$$\left[\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} - \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} (\text{eksperimen}) \right]^2 = \left[\Delta \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right]^2 = 0.84$$

Untuk komposisi lain digunakan cara yang sama, kemudian menghitung RMSD dengan rumus :

$$RMSD = \sqrt{\frac{\left[\sum_{i=1}^n \left\{ \Delta \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right\}^2 \right]}{n}}, \text{ maka didapat}$$

$$RMSD = 1.4117$$

4) Melakukan iterasi nilai a, b, c, dan d sehingga nilai RMSD yang diperoleh minimal.

5) Setelah iterasi, didapat :

a = 0.02483; b = -0.313; c = -0.025; d = 0.042
dengan RMSD = 0.0632

6) Didapat persamaan ekspansi Redlich-Kister :

$$\begin{aligned} \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} &= 0.02483 + (-0.313)(x_3 - x_1) \\ &\quad + (-0.025)(6x_3x_1 - 1) \\ &\quad + (0.042)(x_3 - x_1)(1 - 8x_1x_3) \end{aligned}$$

Kemudian substitusi $x_3 = 1 - x_1$, maka didapat :

$$\begin{aligned}\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} &= 0.02483 + (-0.313)(1 - x_1) \\ &\quad + (-0.025)(6(1 - x_1)x_1 - 1) \\ &\quad + (0.042)((1 - x_1) - x_1)(1 - 8x_1(1 - x_1)) \\ &= F(x)\end{aligned}$$

- 7) Menghitung luasan grafik persamaan ekspansi Redlich-Kister :

$$\int_0^1 F(x) dx_1 = 0.02483$$

- 8) Menghitung A (Luas Absolut) :

$$\begin{aligned}A &= \left| \left(\int_0^1 F(x) dx_1 \right) \right| \times 100\% \\ A &= |(0.02483)| \times 100\% \\ A &= 2.483\end{aligned}$$

A.4.2. Metode *Point Test*

1. Menghitung nilai G^E/RT dengan menggunakan rumus persamaan Gibss-Duhem :

$$\begin{aligned}\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksperimen} &= (x_1 \ln(\gamma_1 eks)) + (x_3 \ln(\gamma_3 eks)) \\ \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksperimen} &= (0.728 \ln(1.0265)) \\ &\quad + (0.272 \ln(0.946)) \\ \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksperimen} &= 0.004\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama didapatkan G^E/RT eksperimen untuk tiap kondisi T (eksperimen) dan x_1 (eksperimen).

2. Melakukan plot grafik antara G^E/RT eksperimen dan x_1 .
3. Menghitung koefisien persamaan ekspansi Redlich-Kister :

- 1) Persamaan Redlich-Kister :

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_3 [B + C(x_1 - x_3) + D(x_1 - x_3)^2 + E(x_1 - x_3)^3]$$

*nilai B, C, D, dan E mula-mula dilakukan trial.

- 2) Menghitung G^E/RT :

Asumsi awal :

B = 1; C = 1; D = 1; E = 1, maka :

$$\frac{G^E}{RT} = 0.728 \times 0.272 [1 + 1(0.728 - 0.272) + 1(0.728 - 0.272)^2 + 1(0.728 - 0.272)^3]$$

$$\frac{G^E}{RT} = 0.348$$

- 3) Menghitung RMSD :

$$\left[\frac{G^E}{RT} - \frac{G^E}{RT}(\text{eksperimen}) \right]^2 = \left[\frac{\Delta G^E}{RT} \right]^2 = 0.1185$$

Untuk komposisi lain digunakan cara yang sama, kemudian menghitung RMSD dengan rumus :

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left\{ \frac{\Delta G^E}{RT} \right\}^2}{n}}, \text{ maka didapat :}$$

$$RMSD = 0.2144$$

- 4) Melakukan iterasi nilai B, C, D, dan E sehingga nilai RMSD yang diperoleh minimal.
- 5) Setelah iterasi, didapat :
B = 0.0363; C = -0.373; D = 0.124; E = 0.976
dengan RMSD = 0.0077

6) Menghitung nilai δ^* :

$$\delta^* = \frac{d(G^E/RT)_{\text{Redlich-Kister}}}{dx_1} - \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_3}\right)_{\text{Redlich-Kister}}$$

$$\delta^* = \frac{(-0.003 - (-0.0063))}{(0.728 - (0.602))} - 0.1741$$

$$\delta^* = 0.1485$$

7) Menghitung nilai uji *Point Test* (δ) :

$$\delta = \left(\sum_{j=1}^n |\delta^*| \right) / m \times 100\%$$

$$\delta = 0.4111 / 11 \times 100\%$$

$$\delta = 3.737\%$$

A.4.3. Metode *Infinite Dilution Test*

1. Menghitung nilai I_1^* dan I_2^* sebagai berikut :

1) Menghitung nilai $(G^E/RT \cdot x_1 \cdot x_3)$ Redlich-Kister saat $x_1 = 0$ dan saat $x_3 = 0$:

$$\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} = [B + C(x_1 - x_3) + D(x_1 - x_3)^2 + E(x_1 - x_3)^2]$$

$$\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_1=0} = [0.0363 + (-0.373)(0 - 1) + 0.1238(0 - 1)^2 + 0.976(0 - 1)^2]$$

$$\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_1=0} = -0.4431$$

$$\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_3=0} = [0.0363 + (-0.373)(1 - 0) + 0.1238(1 - 0)^2 + 0.976(1 - 0)^2]$$

$$\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_3=0} = 0.7634$$

2) Menghitung nilai $\ln (\gamma_1/\gamma_3)$ Redlich-Kister saat $x_1 = 0$ dan saat $x_3 = 0$:

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} = a + b(x_3 - x_1) + c(6x_3x_1 - 1) + d(x_3 - x_1)(1 - 8x_1x_3)$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0} = a + b(x_3 - x_1) + c(6x_3x_1 - 1) + d(x_3 - x_1)(1 - 8x_1x_3)$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0} = 0.02483 + (-0.313)(1 - 0) + (-0.025)(6.1.0 - 0) + 0.042(1 - 0)(1 - 8.0.1)$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0} = -0.2211$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_3=0} = a + b(x_3 - x_1) + c(6x_3x_1 - 1) + d(x_3 - x_1)(1 - 8x_1x_3)$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_3=0} = 0.02483 + (-0.313)(0 - 1) + (-0.025)(6.0.1 - 1) + 0.042(0 - 1)(0 - 8.1.0)$$

$$\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0} = 0.3208$$

3) Menghitung nilai I_1^* dan I_2^* sebagai berikut :

$$I_1^* = \frac{\left[\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_1=0} - \left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0} \right]}{\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_1=0}}$$

$$I_1^* = \frac{-0.4431 - (-0.2211)}{-0.2211}$$

$$I_1^* = 0.25089$$

$$I_3^* = \frac{\left[\left(\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_3} \right)_{x_3=0} - \left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_3=0} \right]}{\left(\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_3} \right)_{x_3=0}}$$

$$I_3^* = \frac{0.7634 - 0.3208}{0.3208}$$

$$I_3^* = 0.27585$$

2. Menghitung nilai uji *Infinite Dilution* (I_1 dan I_2) sebagai berikut :

$$I_1 = |I_1^*| \times 100\%$$

$$I_1 = 0.25089 \times 100\%$$

$$I_1 = 25.089 \%$$

$$I_3 = |I_3^*| \times 100\%$$

$$I_3 = 0.2756 \times 100\%$$

$$I_3 = 27.585 \%$$

Dengan nilai $A < 3\%$, nilai $\delta < 5\%$, serta nilai I_1 dan $I_2 < 30\%$ dari hasil perhitungan, maka data eksperimen telah memenuhi semua syarat dari ketiga metode dan dapat dinyatakan konsisten.

A.5. Perhitungan Parameter dan Koefisien Aktifitas Fase Sistem Biner dengan Model

Data-data percobaan yang telah diperoleh dan diuji konsistensinya selanjutnya dikorelasikan dengan model UNIQUAC dan NRTL, sehingga diperoleh parameter optimal dari kedua model tersebut. Persamaan UNIQUAC mengandung dua parameter, sedangkan persamaan NRTL mengandung tiga parameter. Berikut ini merupakan langkah perhitungan yang dilakukan pada masing-masing model :

Data yang diketahui :

- Sistem biner pada etanol (1) + 2-butanol (3) :
- $P = 101.33 \text{ kPa}$
- $T = 80 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_1^{\text{sat}} = 78.298 \text{ }^{\circ}\text{C}$; $T_3^{\text{sat}} = 99.599 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $x_1 = 0.728$; $x_3 = 0.272$
- $y_1 = 0.869$
- $P_1^{\text{sat}} = 108.314$

I. Perhitungan NRTL**1. Korelasi Persamaan Koefisien Aktifitas dengan Model Persamaan NRTL**

- 1) Menghitung koefisien aktifitas (γ_i) eksperimen dengan konstanta yang telah dihitung dengan persamaan

$$\gamma_i (\text{eksperimen}) = \frac{y_i P}{x_i P_i^{\text{sat}}}$$

$$\gamma_1 (\text{eksperimen}) = \frac{(0.869)(101.33)}{(0.728)(108.314)} = 1.0265$$

Dengan cara yang sama didapatkan :

$$\gamma_3 (\text{eksperimen}) = 0.946$$

- 2) Mula-mula, mengasumsi nilai b_{13} dan b_{31} untuk suatu nilai sembarang, kemudian dicari nilai parameter b_{13} dan b_{31} yang memiliki nilai *error* yang paling minimum terhadap *objective function* (OF) serta $\alpha = 0.3$.
- 3) Menghitung nilai τ_{13} sebagai berikut :

Dengan, $b_{13} = 100 \text{ cal/mol}$ dan $b_{31} = -100 \text{ cal/mol}$.

$$\tau_{13} = \frac{b_{13}}{RT}$$

$$\tau_{13} = \frac{100}{1.987 \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right) \cdot 353.15 \text{ K}} = 0.1425$$

Dengan cara yang sama, diperoleh juga:

$$\tau_{31} = -0.1425$$

- 4) Menghitung G_{13} dan G_{31} , dengan $\alpha = 0.1$:

$$G_{ij} = \exp (-\alpha \tau_{ij})$$

$$G_{13} = \exp (-\alpha \tau_{13})$$

$$G_{13} = \exp (-0.1 \times 0.1425)$$

$$G_{13} = 0.958$$

Dengan cara yang sama didapatkan $G_{31} = 1.044$

- 5) Parameter biner persamaan NRTL dalam menghitung koefisien aktifitas (γ):

$$\gamma_1(calc) = \exp \left(x_3^2 \left[\tau_{31} \left(\frac{G_{31}}{x_1 + x_3 G_{31}} \right)^2 + \left(\frac{G_{13} \tau_{13}}{(x_3 + x_1 G_{13})^2} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_1(calc)$$

$$= \exp \left(0.272^2 \left[-0.1425 \left(\frac{1.044}{0.728 + (0.272)(1.044)} \right)^2 + \left(\frac{(0.958)(0.1425)}{(0.272 + (0.728)(0.958))^2} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_1 = 0.999$$

$$\gamma_3(calc) = \exp \left(x_1^2 \left[\tau_{13} \left(\frac{G_{13}}{x_3 + x_1 G_{13}} \right)^2 + \left(\frac{G_{31} \tau_{31}}{(x_1 + x_3 G_{31})^2} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_3(calc)$$

$$= \exp \left(0.728^2 \left[0.1425 \left(\frac{0.958}{0.272 + (0.728)(0.958)} \right)^2 + \left(\frac{(1.044)(0.1425)}{(0.728 + (0.272)(1.044))^2} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_3 = 0.997$$

- 6) Setelah diperoleh nilai γ_1 dan γ_3 eksperimen maupun secara perhitungan untuk masing-masing komposisi x_1 , maka langkah selanjutnya adalah menghitung *Objective Function* (OF) dengan persamaan :

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{calc}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2$$

$$OF = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_1^{eksperimen} - \gamma_1^{calc}}{\gamma_1^{eksperimen}} \right)^2 + \left(\frac{\gamma_3^{eksperimen} - \gamma_3^{calc}}{\gamma_3^{eksperimen}} \right)^2$$

Nilai OF yang diperoleh adalah 0.15493.

- 7) Menghitung nilai *Excess Gibbs* perhitungan dan eksperimen:

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = (x_1 \ln(\gamma_1^{calc})) + (x_3 \ln(\gamma_3^{calc}))$$

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = (0.728 \ln(0.999)) + (0.272 \ln(0.997))$$

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = -0.0012$$

Dengan cara yang sama untuk eksperimen, didapatkan:

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksperimen} = 0.004$$

- 8) Menghitung deviasi *Excess Gibbs* dengan menggunakan RMSD :

$$RMSD \left(\frac{G^E}{RT} \right) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksp} - \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} \right\}^2}{n}}$$

$$RMSD \left(\frac{G^E}{RT} \right) = 0.02105$$

- 9) Selanjutnya mengiterasi nilai OF tersebut terhadap b_{13} dan b_{31} dari asumsi awal, sehingga didapatkan nilai

sekecil mungkin. Dengan menggunakan fasilitas *Solver* yang ada pada Microsoft Excel, sehingga diperoleh :

$$OF = 0.0743$$

$$RMSD G^E/RT = 0.0482$$

$$\alpha = 0.3$$

$$b_{13} = 484.199 \text{ cal/mol}$$

$$b_{31} = -496.32 \text{ cal/mol}$$

2. Perhitungan Prediksi T-x-y BUBLE T untuk Kesetimbangan Uap-Cair

Dari parameter biner yang diperoleh dari perhitungan diatas akan diprediksi kurva T-x-y. Langkah-langkah perhitungan BUBLE T adalah sebagai berikut:

- 1) Menghitung nilai awal T untuk *trial* dengan persamaan :

$$T = \sum x_i T_i^{sat}$$

$$T = x_1 T_1^{sat} + x_3 T_3^{sat}$$

$$T = (0.728)(78.298 ^\circ C) + (0.272)(99.599 ^\circ C)$$

$$T = 84.0918 ^\circ C$$

- 2) Menghitung P_1^{sat} dan P_2^{sat} dengan menggunakan nilai T yang baru, dengan menggunakan persamaan *Antoine* diperoleh :

$$P_1^{sat} \text{ calc} = 112.952 \text{ kPa}$$

$$P_2^{sat} \text{ calc} = 48.71 \text{ kPa}$$

- 3) Menghitung γ_i untuk masing-masing komponen dengan menggunakan NRTL dengan parameter biner yang didapat :

$$\gamma_1 = 0.985$$

$$\gamma_3 = 0.918$$

- 4) Menghitung nilai P_j^{sat} dengan persamaan, dimana komponen j adalah komponen kunci. Ditetapkan komponen 2 sebagai komponen kunci, sebagai berikut :

$$P_j^{sat} = \frac{P}{\sum x_i \gamma_i (P_i^{sat} / P_j^{sat})}$$

$$P_j^{sat} = 112.95 \text{ kPa}$$

- 5) Menghitung nilai T_{baru} yang baru dari parameter kunci :

$$T_i^{sat} = \frac{B_i}{A_i - \ln P} - C_i$$

$$T_{baru} = 81.0753456 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- 6) Jika $T_{awal} - T_{baru} < error$ yang ditetapkan, maka T_{baru} adalah T yang dicari, dan lanjut ke langkah 7 (selanjutnya), jika $T_{awal} - T_{baru} > error$, maka ulangi perhitungan dari langkah 1, dengan menjadikan T_{baru} sebagai T untuk perhitungan dengan perhitungan RMSD T :

Syarat : toleransi nilai $error \Delta T < 0.001$

Dari percobaan ini didapatkan nilai T konvergen pada :

$T_{awal} = 81.075344 \text{ } ^\circ\text{C}$, maka

$T_{calc} = 79.775 \text{ } ^\circ\text{C}$

$$RMSD T = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (T_{eksp} - T_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$RMSD T = 0.282$$

- 7) Menghitung RMSD y dari nilai y_1 dan y_2 dengan persamaan :

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P}$$

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P} = \frac{(0.728)(0.985)(112.95 \text{ kPa})}{(93.177 \text{ kPa})}$$

$$y_1 = 0.8695 ; y_3 = 0.1305$$

$$RMSD y = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (y(1)_{eksp} - y(1)_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$RMSD y = 0.0186$$

- 8) Dengan menggunakan langkah yang sama untuk data percobaan sistem biner yang lain.

II. Perhitungan UNIQUAC

1. Korelasi Persamaan Koefisien Aktifitas dengan Model Persamaan UNIQUAC

- 1) Menghitung koefisien aktifitas (γ_i) eksperimen dengan konstanta yang telah dihitung dengan persamaan :

$$\gamma_i (\text{eksperimen}) = \frac{y_i P}{x_i P_i^{\text{sat}}}$$

$$\gamma_1 (\text{eksperimen}) = \frac{(0.869)(101.33)}{(0.728)(108.314)} = 1.0265$$

Dengan cara yang sama didapatkan :

$$\gamma_3 (\text{eksperimen}) = 0.946$$

- 2) Mula-mula, mengasumsi nilai A_{13} dan A_{31} untuk suatu nilai sembarang, kemudian dicari nilai parameter A_{13} dan A_{31} yang memiliki nilai *error* yang paling minimum terhadap *objective function* (OF) serta z sebesar 10.
- 3) Parameter struktural r dan q sebagai berikut :

Tabel A.4. Data Parameter Struktural r dan q (Prausnitz, 1999)

Komponen	r	q	l
Etanol (1)	2.576	2.588	-1.638
Aseton (2)	2.574	2.336	-0.386
2-Butanol (3)	2.121	1.968	-0.3548

*Dimana r = parameter volume komponen, q = parameter luasan komponen.

- 4) Menghitung nilai ϕ_1 sebagai berikut :
 Dengan, $A_{13} = 100$ cal/mol dan $A_{31} = 50$ cal/mol.

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{x_1 r_1 + x_3 r_3}$$

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{x_1 r_1}{x_1 r_1 + x_3 r_3} \\ &= \frac{(0.728)(2.576)}{(0.728)(2.576) + (0.272)(2.121)} \end{aligned}$$

$$\phi_1 = 0.765$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\phi_3 = 0.235$

- 5) Menghitung nilai θ_1 sebagai berikut :

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{x_1 q_1 + x_2 q_2}$$

$$\theta_1 = \frac{x_1 q_1}{x_1 q_1 + x_2 q_2} = \frac{(0.728)(2.588)}{(0.728)(2.588) + (0.272)(1.968)}$$

$$\theta_1 = 0.779$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\theta_3 = 0.221$

- 6) Menghitung nilai I_1 sebagai berikut :

$$I_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

$$I_1 = \frac{z}{2}(r_1 - q_1) - (r_1 - 1)$$

$$= \frac{10}{2}(2.576 - 2.588) - (2.576 - 1)$$

$$I_1 = -1.638$$

Dengan cara yang sama, didapatkan :

$$I_2 = -0.386; I_3 = -0.3548$$

- 7) Menghitung nilai τ_{13} sebagai berikut :

$$\tau_{ij} = \exp\left(-\frac{A_{ij}}{RT}\right)$$

$$\tau_{13} = \exp\left(-\frac{A_{13}}{RT}\right)$$

$$\tau_{13} = \exp\left(-\frac{100}{(1.986 \frac{\text{cal}}{\text{mol} \cdot \text{K}})(353.15 \text{ K})}\right) = 0.867$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\tau_{31} = 0.931$

- 8) Parameter biner persamaan UNIQUAC menghitung koefisien aktifitas (γ) :

$$\begin{aligned}
\ln \gamma_1 \text{ calc} &= \ln \frac{\varphi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\varphi_1} + \varphi_3 \left(I_1 - \frac{r_1}{r_3} I_3 \right) \\
&\quad - q_1^l \ln(\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}) \\
&\quad + \theta_3^l q_1^l \left(\frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}} - \frac{\tau_{13}}{\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}} \right) \\
\gamma_1 \text{ calc} &= \exp \left(\ln \frac{\varphi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\varphi_1} + \varphi_3 \left(I_1 - \frac{r_1}{r_3} I_3 \right) \right. \\
&\quad - q_1^l \ln(\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}) \\
&\quad + \theta_3^l q_1^l \left(\frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}} \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\tau_{13}}{\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}} \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\gamma_1 \text{ calc} = 1.036$$

$$\begin{aligned}
\ln \gamma_3 \text{ calc} &= \ln \frac{\varphi_3}{x_3} + \frac{z}{2} q_3 \ln \frac{\theta_3}{\varphi_3} + \varphi_1 \left(I_3 - \frac{r_3}{r_1} I_1 \right) \\
&\quad - q_3^l \ln(\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}) \\
&\quad + \theta_1^l q_3^l \left(\frac{\tau_{13}}{\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}} - \frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}} \right) \\
\gamma_3 \text{ calc} &= \exp \left(\ln \frac{\varphi_3}{x_3} + \frac{z}{2} q_3 \ln \frac{\theta_3}{\varphi_3} + \varphi_1 \left(I_3 - \frac{r_3}{r_1} I_1 \right) \right. \\
&\quad - q_3^l \ln(\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}) \\
&\quad + \theta_1^l q_3^l \left(\frac{\tau_{13}}{\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{13}} \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_3^l \tau_{31}} \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\gamma_3 \text{ calc} = 1.931$$

- 9) Setelah diperoleh nilai γ_1 dan γ_3 eksperimen maupun secara perhitungan untuk masing-masing komposisi x_1 ,

maka langkah selanjutnya adalah menghitung OF dengan persamaan :

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{calc}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2$$

$$OF = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_1^{eksperimen} - \gamma_1^{calc}}{\gamma_1^{eksperimen}} \right)^2 + \left(\frac{\gamma_3^{eksperimen} - \gamma_3^{calc}}{\gamma_3^{eksperimen}} \right)^2$$

Nilai OF yang diperoleh adalah 5.955.

- 10) Menghitung nilai *Excess Gibbs* perhitungan dan eksperimen :

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = (x_1 \ln(\gamma_1^{calc})) + (x_3 \ln(\gamma_3^{calc}))$$

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = (0.728 \ln(1.068)) + (0.272 \ln(1.783))$$

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} = 0.205$$

Dengan cara yang sama untuk eksperimen, didapatkan :

$$\left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksperimen} = 0.004$$

- 11) Menghitung deviasi *Excess Gibbs* dengan menggunakan RMSD :

$$RMSD \left(\frac{G^E}{RT} \right) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left\{ \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{eksp} - \left(\frac{G^E}{RT} \right)_{calc} \right\}^2}{n}}$$

$$RMSD \left(\frac{G^E}{RT} \right) = 0.219$$

- 12) Selanjutnya mengiterasi nilai OF tersebut terhadap A_{13} dan A_{31} dari asumsi awal, sehingga didapatkan nilai sekecil mungkin. Dengan menggunakan fasilitas *Solver* yang ada pada Microsoft Excel, sehingga diperoleh :

$$\begin{aligned} \text{OF} &= 0.0174 \\ \text{RMSD } G^E/RT &= 0.0143 \\ A_{12} &= -65.417 \text{ K} \\ A_{21} &= -183.803 \text{ K} \end{aligned}$$

2. Perhitungan Prediksi T-x-y BUBLE T untuk Kesetimbangan Uap-Cair

Dari parameter biner yang diperoleh dari perhitungan diatas akan diprediksi kurva T-x-y. Langkah-langkah perhitungan BUBLE T adalah sebagai berikut :

- 1) Menghitung nilai awal T untuk *trial* dengan persamaan :

$$\begin{aligned} T &= \sum x_i T_i^{\text{sat}} \\ T &= x_1 T_1^{\text{sat}} + x_3 T_3^{\text{sat}} \\ T &= (0.728)(78.298 ^\circ\text{C}) + (0.272)(99.599 ^\circ\text{C}) \\ T &= 84.0918 ^\circ\text{C} \end{aligned}$$

- 2) Menghitung P_1^{sat} dan P_2^{sat} dengan menggunakan nilai T yang baru, dengan menggunakan persamaan *Antoine* diperoleh :

$$\begin{aligned} P_1^{\text{sat}} \text{ calc} &= 112.952 \text{ kPa} \\ P_2^{\text{sat}} \text{ calc} &= 48.71 \text{ kPa} \end{aligned}$$

- 3) Menghitung γ_i untuk masing-masing komponen dengan menggunakan UNIQUAC dengan parameter biner yang didapat:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 1.061 \\ \gamma_3 &= 0.888 \end{aligned}$$

- 4) Menghitung nilai P_j^{sat} dengan persamaan, dimana komponen j adalah komponen kunci. Ditetapkan komponen 2 sebagai komponen kunci, sebagai berikut:

$$P_j^{sat} = \frac{P}{\sum x_i \gamma_i (P_i^{sat} / P_j^{sat})}$$

$$P_j^{sat} = 79.533 \text{ kPa}$$

- 5) Menghitung nilai T_{baru} yang baru dari parameter kunci :

$$T_i^{sat} = \frac{B_i}{A_i - \ln P} - C_i$$

$$T_{baru} = 79.5329062 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- 6) Jika $T_{awal} - T_{baru} < error$ yang ditetapkan, maka T_{baru} adalah T yang dicari, dan lanjut ke langkah 7 (selanjutnya), jika $T_{awal} - T_{baru} > error$, maka ulangi perhitungan dari langkah 1, dengan menjadikan T_{baru} sebagai T untuk perhitungan dengan perhitungan RMSD T :

Syarat : toleransi nilai $error \Delta T < 0.001$

Dari percobaan ini didapatkan nilai T konvergen pada :

$T_{awal} = 79.5329062 \text{ } ^\circ\text{C}$, maka

$T_{calc} = 79.53290885 \text{ } ^\circ\text{C}$

$$RMSD T = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (T_{eksp} - T_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$RMSD T = 0.412$$

- 7) Menghitung RMSD y dari nilai y_1 dan y_2 dengan persamaan :

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P}$$

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P} = \frac{(0.728)(1.061)(106.35 \text{ kPa})}{(93.177 \text{ kPa})}$$

$$y_1 = 0.882 ; y_3 = 0.118$$

$$RMSD y = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (y(1)_{eksp} - y(1)_{calc})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

$$RMSD y = 0.01606$$

- 8) Dengan menggunakan langkah yang sama untuk data percobaan sistem biner yang lain.

B. Perhitungan Ternern

B.1. Perhitungan Parameter dan Koefisien Aktifitas Fase Sistem Ternern dengan Model

Data-data percobaan yang telah diperoleh dan diuji konsistensinya selanjutnya dikorelasikan dengan model UNIQUAC dan NRTL, sehingga diperoleh parameter optimal dari kedua model tersebut. Parameter yang telah didapat dari tiap sistem biner digunakan untuk perhitungan sistem ternern yang akan dibandingkan dengan hasil eksperimen ternern. Berikut ini merupakan langkah perhitungan yang dilakukan pada masing-masing model :

Misal untuk data yang diketahui :

- $P = 101.33 \text{ kPa}$
- $T = 85.2 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_1^{\text{sat}} = 78.298 \text{ }^{\circ}\text{C};$
- $T_2^{\text{sat}} = 56.4 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- $T_3^{\text{sat}} = 99.599 \text{ }^{\circ}\text{C};$
- $x_1 = 0.101;$
- $x_2 = 0.120;$
- $x_3 = 0.779;$
- $y_1 = 0.093;$
- $y_2 = 0.208;$
- $y_3 = 0.697;$
- $P_1^{\text{sat}} = 132.301 \text{ kPa}$

1. Korelasi Persamaan Koefisien Aktifitas dengan Model Persamaan NRTL

Persamaan yang dipakai untuk menghitung parameter ternern dengan persamaan NRTL adalah :

$$\ln\gamma_1 = \frac{\tau_{11}G_{11}x_1 + \tau_{21}G_{21}x_2 + \tau_{31}G_{31}x_3}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} + \frac{x_1G_{11}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \left(\tau_{11} - \frac{x_1\tau_{11}G_{11} + x_2\tau_{21}G_{21} + x_3\tau_{31}G_{31}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \right) + \frac{x_2G_{12}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \left(\tau_{12} - \frac{x_1\tau_{12}G_{12} + x_2\tau_{22}G_{22} + x_3\tau_{32}G_{32}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \right) + \frac{x_3G_{13}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \left(\tau_{13} - \frac{x_1\tau_{13}G_{13} + x_2\tau_{23}G_{23} + x_3\tau_{33}G_{33}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \right)$$

$$\ln\gamma_2 = \frac{\tau_{12}G_{12}x_1 + \tau_{22}G_{22}x_2 + \tau_{32}G_{32}x_3}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} + \frac{x_1G_{21}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \left(\tau_{21} - \frac{x_1\tau_{11}G_{11} + x_2\tau_{21}G_{21} + x_3\tau_{31}G_{31}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \right) + \frac{x_2G_{22}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \left(\tau_{22} - \frac{x_1\tau_{12}G_{12} + x_2\tau_{22}G_{22} + x_3\tau_{32}G_{32}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \right) + \frac{x_3G_{23}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \left(\tau_{23} - \frac{x_1\tau_{13}G_{13} + x_2\tau_{23}G_{23} + x_3\tau_{33}G_{33}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \right)$$

$$\ln\gamma_3 = \frac{\tau_{13}G_{13}x_1 + \tau_{23}G_{23}x_2 + \tau_{33}G_{33}x_3}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} + \frac{x_1G_{31}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \left(\tau_{31} - \frac{x_1\tau_{11}G_{11} + x_2\tau_{21}G_{21} + x_3\tau_{31}G_{31}}{G_{11}x_1 + G_{21}x_2 + G_{31}x_3} \right) + \frac{x_2G_{32}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \left(\tau_{32} - \frac{x_1\tau_{12}G_{12} + x_2\tau_{22}G_{22} + x_3\tau_{32}G_{32}}{G_{12}x_1 + G_{22}x_2 + G_{32}x_3} \right) + \frac{x_3G_{33}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \left(\tau_{33} - \frac{x_1\tau_{13}G_{13} + x_2\tau_{23}G_{23} + x_3\tau_{33}G_{33}}{G_{13}x_1 + G_{23}x_2 + G_{33}x_3} \right)$$

Dalam perhitungan ini ditetapkan parameter ketidakacakan (α) sebesar 0.3 dan parameter yang lain didapatkan dari eksperimen sebelumnya. Dimana parameter sistem biner yang telah didapat adalah $b_{13} = 484.199$; $b_{31} = -496.32$; $b_{12} = 473.58$; $b_{21} = -53.89$; $b_{23} = -158.09$; dan $b_{32} = 55.64$.

Dari rumus yang telah dijabarkan diatas maka didapatkan harga $\gamma_1 = 0.942$; $\gamma_2 = 0.881$; $\gamma_3 = 2.17$. Kemudian dengan cara yang sama mencari nilai RMSD G^E/RT , RMSD T, RMSD y_1 , RMSD y_2 , dan RMSD y_3 seperti pada perhitungan sistem biner.

2. Korelasi Persamaan Koefisien Aktivitas dengan Model Persamaan UNIQUAC

Persamaan yang dipakai dalam menentukan parameter terner pada persamaan UNIQUAC adalah :

$$\ln \gamma_1 = \ln \frac{\varphi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\varphi_1} + l_1 - \frac{\varphi_1}{x_1} (x_1 l_1 + x_2 l_2 + x_3 l_3) - q_1 \ln (\theta_1 \tau_{11} + \theta_2 \tau_{21} + \theta_3 \tau_{31}) + q_1 - q_1 \left(\frac{\theta_1 \tau_{11}}{\theta_1 \tau_{11} + \theta_2 \tau_{21} + \theta_3 \tau_{31}} + \frac{\theta_2 \tau_{12}}{\theta_1 \tau_{12} + \theta_2 \tau_{22} + \theta_3 \tau_{32}} + \frac{\theta_3 \tau_{13}}{\theta_1 \tau_{13} + \theta_2 \tau_{23} + \theta_3 \tau_{33}} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = \ln \frac{\varphi_2}{x_2} + \frac{z}{2} q_2 \ln \frac{\theta_2}{\varphi_2} + l_2 - \frac{\varphi_2}{x_2} (x_1 l_1 + x_2 l_2 + x_3 l_3) - q_2 \ln (\theta_1 \tau_{12} + \theta_2 \tau_{22} + \theta_3 \tau_{32}) + q_2 - q_2 \left(\frac{\theta_1 \tau_{21}}{\theta_1 \tau_{11} + \theta_2 \tau_{21} + \theta_3 \tau_{31}} + \frac{\theta_2 \tau_{22}}{\theta_1 \tau_{12} + \theta_2 \tau_{22} + \theta_3 \tau_{32}} + \frac{\theta_3 \tau_{23}}{\theta_1 \tau_{13} + \theta_2 \tau_{23} + \theta_3 \tau_{33}} \right)$$

$$\ln \gamma_3 = \ln \frac{\varphi_3}{x_3} + \frac{z}{2} q_3 \ln \frac{\theta_3}{\varphi_3} + l_3 - \frac{\varphi_3}{x_3} (x_1 l_1 + x_2 l_2 + x_3 l_3) - q_3 \ln (\theta_1 \tau_{13} + \theta_2 \tau_{23} + \theta_3 \tau_{33}) + q_3 - q_3 \left(\frac{\theta_1 \tau_{31}}{\theta_1 \tau_{11} + \theta_2 \tau_{21} + \theta_3 \tau_{31}} + \frac{\theta_2 \tau_{32}}{\theta_1 \tau_{12} + \theta_2 \tau_{22} + \theta_3 \tau_{32}} + \frac{\theta_3 \tau_{33}}{\theta_1 \tau_{13} + \theta_2 \tau_{23} + \theta_3 \tau_{33}} \right)$$

Dalam eksperimen ini digunakan parameter yang telah didapatkan dari eksperimen sebelumnya. Harga dari parameter-parameter tersebut adalah $A_{12} = 89.328$, $A_{21} = 67.823$; $A_{13} = -65.417$; $A_{31} = -183.8$; $A_{23} = -18.12$; dan $A_{32} = 34.993$.

Dari persamaan yang telah dijelaskan maka didapatkan harga $\gamma_1 = 0.839$; $\gamma_2 = 0.830$; dan $\gamma_3 = 0.999$. Kemudian dengan cara yang sama mencari nilai RMSD G^E/RT , RMSD T,

RMSD y_1 , RMSD y_2 , dan RMSD y_3 seperti pada perhitungan sistem biner.

(HALAMAN INI SENGAJA DIKOSONGKAN)